

4^ο

ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΧΗΜΕΙΑΣ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΚΑΙ ΠΡΟΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΦΟΙΤΗΤΩΝ ΑΠΘ

20 - 21 / 3 / 2021

«Έρευνα, η προοπτική για την ανάπτυξη»

ΒΙΒΛΙΟ ΠΕΡΙΛΗΨΕΩΝ



ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΟΝΙΚΗΣ

Βιβλίο Περιλήψεων

4^ο Συνέδριο Χημείας
Μεταπτυχιακών και Προπτυχιακών Φοιτητών
του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης
20 & 21 Μαρτίου
2021

Επιμέλεια:

Δρ. Στεργιανή Ορδούδη, ΕΔΙΠ Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
Δρ. Δημήτριος Γκιλιόπουλος, Μεταδιδακτορικός ερευνητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
Δρ. Ευαγγελία Παρισσοπούλου, Μεταδιδακτορική ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
Δρ. Μαρία Πίττου, Μεταδιδακτορική ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Πρόεδροι Συνεδρίου

Παναγιώτης Σπαθής, Πρόεδρος Τμήματος Χημείας ΑΠΘ

Βικτωρία Σαμανίδου, Πρόεδρος Περιφερειακού Τμήματος Κεντρικής και Δυτικής Μακεδονίας (ΠΤΚΔΜ) της Ένωσης Ελλήνων Χημικών (ΕΕΧ)

Ελένη Δεληγιάννη, Πρόεδρος ΔΣ Συνδέσμου Χημικών Βορείου Ελλάδος

Επιστημονική Επιτροπή

Συντονίστρια: Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου, Αναπλ. Καθηγήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Αναλυτική Χημεία – Βιοανάλυση – Αρχαιομετρία – Έλεγχος Ποιότητας

- **Παρασκευάς Τζαναβάρας**, Επίκ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Δρ. Σοφία Καραστογιάννη**, Μεταδιδ. ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Βασίλειος Αλαμπάνος**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Ανόργανη και Βιοανόργανη Χημεία – Νανοτεχνολογία

- **Αικατερίνη Δενδρινού-Σαμαρά**, Καθηγήτρια ΑΠΘ
- **Δρ., Κ. Γιαννούση**, Μεταδιδ. ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Βιοχημεία – Κλινική Χημεία

- **Δρ Ρηγίνη Παπή** ΕΔΙΠ, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Αγλαΐα Μάντσου**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Διδακτική της Χημείας

- **Παναγιώτης Γιαννακουδάκης**, Καθηγητής ΑΠΘ
- **Δρ. Ανδρέας Καργόπουλος**, Μεταδιδ. ερευνητής (MsEdu, PhD), Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ

Οργανική Χημεία – Φυσικά προϊόντα

- **Ιωάννης Λυκάκης**, Αναπλ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Δημήτρης Γεωργαντάς**, Μεταπτ. φοιτητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Φυσική – Θεωρητική – Υπολογιστική Χημεία

- **Δήμητρα Σαζού**, Καθηγήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Εμμανουήλ Κουκάρας**, Επίκ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Δρ. Αγγελική Μπαντή**, Μεταδιδ. ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Αιμιλία Παπασούλη**, Υποψήφια διδάκτορας

Τοξικολογία – Φαρμακευτική Χημεία – Έλεγχος Ποιότητας Φαρμάκων

- **Ελένη Γκίκα**, Επίκ. Καθηγήτρια, Τμήμα Ιατρικής ΑΠΘ
- **Κωνσταντίνος Ζαχαρής**, Επίκ. Καθηγητής, Τμήμα Φαρμακευτικής ΑΠΘ
- **Δρ. Χριστίνα Βιργιλίου**, Μεταδιδ. ερευνήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Χημεία και Τεχνολογία Περιβάλλοντος – Έλεγχος Ρύπανσης

- **Δημητρούλα Λαμπροπούλου**, Αναπλ. Καθηγήτρια, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Neda Malesic Eleftheriadou**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Χημεία και Τεχνολογία Πολυμερών

- **Νικόλαος Νικολαΐδης**, Επίκ. Καθηγητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Λάζαρος Παπαδόπουλος**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Χημεία και Τεχνολογία Τροφίμων

- **Νικόλαος Νενάδης**, Επίκ. Καθηγητής ΑΠΘ
- **Μαρία Παπαποστόλου**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Χημική Τεχνολογία – Πράσινη Χημεία – Υλικά

- **Κωνσταντίνος Τριανταφυλλίδης**, Καθηγητής, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ
- **Χριστίνα Παππά**, Υποψ. διδάκτορας, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ

Οργανωτική Επιτροπή

Συντονίστρια: Δρ Στεργιανή Ορδούδη, ΕΔΙΠ, Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, ΑΠΘ

Εκ μέρους της ΕΕΧ-ΠΤΚΔΜ

- Μιχάλης Τερζίδης, Αντιπρόεδρος
- Βασίλειος Κουλός, Γραμματέας
- Εμμανουήλ Δάφτσης, Ταμίας

Εκ μέρους του ΣΧΒΕ

- Πολυχρόνης Καραγκιοζίδης, Αντιπρόεδρος
- Αθανασία Τόλκου, Γενική Γραμματέας
- Ιωάννης Βαφειάδης, Ταμίας
- Ευγενία Λυμπεράκη, μέλος ΔΣ
- Δέσποινα Σιδηροπούλου, μέλος ΔΣ
- Μαρία Ξανθοπούλου, μέλος ΔΣ
- Άννα Γκουλιώτη, μέλος ΔΣ
- Στέφανος Γωγάκος, μέλος ΔΣ

Εκ μέρους του ΑΠΘ

- Δημήτριος Αχιλιάς, Καθηγητής, Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, ΑΠΘ
- Δρ. Δημήτριος Γκιλιόπουλος, Μεταδιδακτορικός ερευνητής, Εργαστήριο Χημικής και Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας, ΑΠΘ
- Δρ. Αλεξάνδρα Ζαμπούλη, Μεταδιδακτορική ερευνήτρια, Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, ΑΠΘ
- Φωτεινή Ζούγκρου, ΕΤΕΠ, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, ΑΠΘ
- Δρ. Αθανάσιος Κούρας, ΕΔΙΠ, Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, ΑΠΘ
- Θεόδωρος Λαζαρίδης, Επικ. Καθηγητής, Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, ΑΠΘ
- Ιωάννης Λυκάκης, Αναπληρωτής Καθηγητής Εργαστήριο Οργανικής Χημείας, ΑΠΘ
- Αικατερίνη Μαρκοπούλου, Αναπλ. Καθηγήτρια Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, ΑΠΘ
- Δρ. Ευαγγελία Παρισσοπούλου, Μεταδιδακτορική ερευνήτρια Εργαστήριο Χημικής Εκπαίδευσης, Εφαρμογής Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνιών στη Χημεία, ΑΠΘ

- Δρ. Μαρία Πίττου, Μεταδιδακτορική ερευνήτρια Εργαστήριο Βιοχημείας, ΑΠΘ
- Σωτήριος Σωτηρόπουλος, Καθηγητής Εργαστήριο Φυσικοχημείας, ΑΠΘ
- Δρ. Νικόλαος Χαριστός, ΕΔΙΠ Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, ΑΠΘ
- Ευφημία Χατζηδημητρίου, Επικ. Καθηγήτρια, Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, ΑΠΘ

Ομάδα εθελοντών:

Υποψήφιοι Διδάκτορες

- Μαρία Λαζαρίδου

Μεταπτυχιακοί Φοιτητές

- Δέσποινα Αθανασιάδου
- Παναγιώτα Αλβανούδη
- Μαγδαληνή Βλαδίτση
- Σοφία Γριζοπούλου
- Γιώργος Ιωάννου
- Ελπίς Σφαιροπούλου
- Μυρσίνη Χρόνη

Προπτυχιακοί Φοιτητές Τμήματος Χημείας ΑΠΘ

- Κωνσταντίνα Βαλασίδου
- Δημήτριος Βλάχος
- Δήμητρα Βλησσάρη
- Στέλλα-Δανάη Γρούγκα
- Καλλιόπη Εμμανουηλίδου
- Ελευθερία Καζαλτζή
- Ελένη Καπίδου
- Σοφία Κιρτζίκη
- Μαρία Κίτσου
- Ορέστης Κολοβόζης
- Μαρία Κούση
- Αικατερίνα Μαρκάκη
- Όλγα Μελισίδου
- Αναστασία Μπαζάκα
- Δανάη-Φωτεινή Μπλάνα

- Ιωάννης Μυρισίδης
- Βασιλική Παπαζίδου
- Χριστίνα Παπαθεοχαρίδου
- Ανατολή Παρασχάκη
- Φωτεινή Ραπτοπούλου
- Δήμητρα Ραχμανίδη
- Αθηνά-Άννα Ρίστοβ
- Αγγελική-Αργυρή Σαββόπουλου-Τζακοπούλου
- Στυλιανή- Ειρήνη Σαρηβασιλείου
- Σταύρος Στεφανίδης
- Ρεβέκκα Τσαγγάρη
- Γλυκερία Τσομπανοπούλου
- Άννα Μαγδαληνή Ψυρίλλου

Γραμματειακή Υποστήριξη:

- Νατάσα Καλογιούρη, Μεταδιδακτορική Ερευνήτρια
- Ναταλία Μανούση, Υποψ. διδάκτορας

Βασική Θεματολογία του Συνεδρίου

1. Αναλυτική Χημεία – Βιοανάλυση – Αρχαιομετρία – Έλεγχος Ποιότητας
2. Ανόργανη και Βιοανόργανη Χημεία – Νανοτεχνολογία
3. Βιοχημεία – Κλινική Χημεία
4. Διδακτική της Χημείας
5. Οργανική Χημεία – Φυσικά προϊόντα
6. Φυσική- Θεωρητική –Υπολογιστική Χημεία
7. Τοξικολογία-Φαρμακευτική Χημεία – Έλεγχος Ποιότητας Φαρμάκων
8. Χημεία και Τεχνολογία Περιβάλλοντος – Έλεγχος Ρύπανσης
9. Χημεία και Τεχνολογία Πολυμερών
10. Χημεία και Τεχνολογία Τροφίμων
11. Χημική Τεχνολογία – Πράσινη Χημεία – Υλικά

ΑΝΑΛΥΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΡΓΑΣΙΩΝ ΤΟΥ ΣΥΝΕΔΡΙΟΥ**ΣΑΒΒΑΤΟ 20 ΜΑΡΤΙΟΥ****ΑΙΘΟΥΣΑ 1**

<https://authqr.zoom.us/j/96580049566?pwd=SiduUHJZM0UvYUtqa2t2VEQrSidGZz09>

16:00-18:30

Meeting ID: 965 8004 9566, Passcode: 813407

ΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ

Προεδρείο: Νικόλαος Νικολαΐδης, Επικ. Καθηγητής & Λάζαρος Παπαδόπουλος, Υποψ. διδάκτορας

16:00-16:15

3D Βιοεκτυπώσιμα πολυμερικά ικρίωματα χιτοζάνης-πηκτίνης με αυξημένη βιοπροσκόλληση κυττάρων για εφαρμογές στην ανάπτυξη δέρματος
Αργυρούλα Κεχαγιά, Απόφοιτη Τμ. Χημείας ΑΠΘ

16:15-16:30

Σύνθεση και μελέτη συμπολυμερών πολυ(γαλακτικού οξέος)- πολυ(αδιπικού αιθυλενεστέρα) με την τεχνική ανάμιξης τήγματος για ενθυλάκωση αντικαρκινικών φαρμάκων

Κωνσταντίνος Τσαχουρίδης, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

16:30-16:45

Παρασκευή και μελέτη ιδιοτήτων φιλμ πολυ(γαλακτικού οξέος) με νανοσωματίδια χιτοζάνης-ενθυλακωμένου αιθέριου ελαίου ρίγανης
Αικατερίνη Καζάκου, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

16:45-17:00

Σύνθεση και χαρακτηρισμός νανოსύνθετων υλικών του πολυ(γαλακτικού οξέος), PLA, με νανοσωματίδια Ag, TiO₂ ή ZnO
Ηλέκτρα Μαυροματίδου, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

17:00-17:15

Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοσυμβατής υδρογέλης Pluronic με φυσικά πολυμερή για 3D εκτύπωση
Ιωάννα Κουμεντάκου, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

17:15-17:30

Παρασκευή και μελέτη συμπολυμερών πολυ(βανιλικού αιθυλενεστέρα) -πολυ(φουρανικού αιθυλενεστέρα)
Ευαγγελία Μπάλλα, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

17:30-17:45

Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με δύο ενεργές ομάδες πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού
Βασίλειος Δανιηλίδης, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

17:45-18:00

Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με μια ενεργό ομάδα πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού
Ελευθερία Γιτσούλη, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

18:00-18:15

Κινητική πολυμερισμού κυανοακρυλικής κόλλας για την αποκατάσταση γυάλινων επιφανειών με τη Φασματοσκοπία Υπερύθρου
Παναγιώτης Μόρφης, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

18:15-18:30

ΣΥΖΗΤΗΣΗ

ΕΠΙΣΗΜΗ ΕΝΑΡΞΗ ΣΥΝΕΔΡΙΟΥ

Προεδρείο: Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου (Συντονίστρια Επιστημονικής Επιτροπής), Στεργιανή Ορδούδη (Συντονίστρια Οργανωτικής Επιτροπής)

Χαιρετισμοί

Πρυτανικές Αρχές ΑΠΘ

Π. Σπαθής, Πρόεδρος Τμήματος Χημείας

Α. Παπαδόπουλος, Πρόεδρος ΕΕΧ

Β. Σαμανίδου, Πρόεδρος ΠΤΚΔΜ-ΕΕΧ

Ε. Δεληγιάννη, Πρόεδρος ΣΧΒΕ

Α. Παρασκευοπούλου, Συντονίστρια Επιστημονικής Επιτροπής

Στ. Ορδούδη, Συντονίστρια Οργανωτικής Επιτροπής

19:00-20:30

ΚΕΝΤΡΙΚΗ ΟΜΙΛΙΑ

"Απόφοιτοι Χημείας και Επαγγελματική Σταδιοδρομία εκτός Ελλάδος"

Δρ. Αθανάσιος Κατσογιάννης

Κοινό Κέντρο Ερευνών, Ευρωπαϊκή Επιτροπή, Ίσπρα, Ιταλία

ΚΥΡΙΑΚΗ 21 ΜΑΡΤΙΟΥ

ΑΙΘΟΥΣΑ 1

<https://authgr.zoom.us/j/96580049566?pwd=SjduUHJZM0UvYUtqa2t2VEQrSjdGZz09>

Meeting ID: 965 8004 9566, Passcode: 813407

ΑΝΑΛΥΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ- ΒΙΟΑΝΑΛΥΣΗ- ΑΡΧΑΙΟΜΕΤΡΙΑ- ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΟΙΟΤΗΤΑΣ

9:30-11:45

Προεδρείο: Πάρις Τζαναβάρας, Επικ. Καθηγητής, Γεώργιος Τσόγκας, Επικ. Καθηγητής & Σοφία Καραστογιάννη, Μεταδιδακτ. ερευνήτρια

9:30-9:45

Αρχαιομετρικές μελέτες ραδιοχρονολόγησης με τη μέθοδο ουρανίου- μολύβδου

Ευσταθία Βουζαζάκη, Απόφοιτος – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

9:45-10:00

Προσδιορισμός της ιστιδίνης σε βιολογικά δείγματα με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής και εκλεκτική εν-ροή αντίδραση μετά την στήλη (HPLC-PCD)

Ειρήνη Σταμπίνα, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

10:00-10:15

Παραγωγοποίηση μετά τη στήλη σε συνδυασμό με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής (HPLC-PCD) για τον προσδιορισμό της ισταμίνης και της ιστιδίνης σε δείγματα τροφίμων

Αποστολία Τσιασιώτη, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

10:15-10:30

Αυτόματη μέθοδος προσδιορισμού του μολύβδου σε πολύ μικρές συγκεντρώσεις σε δείγματα μπύρας με την τεχνική έγχυσης σε ροή (FIA) και On-line εκχύλιση στερεάς φάσης με μικροστήλη προσυγκέντρωσης OasisTM-HLB και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης

Βασιλική- Ευαγγελία Τσαυτάρη, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

ΑΙΘΟΥΣΑ 2

<https://authgr.zoom.us/j/94070552304?pwd=K1VLRkkrWENSM0J5ZUZ4bEIQQ1pLQT09>

Meeting ID: 940 7055 2304, Passcode: 675543

ΒΙΟΧΗΜΕΙΑ- ΚΛΙΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ

Προεδρείο: Ρηγίνη Παπή, ΕΔΙΠ & Αγλαΐα Μάντσου, Υποψ. διδάκτορας

9:30-10:45

De novo σύνθεση γενετικών αλληλουχιών για recombinamers

Παναγιώτης Κεραμιδάς, Μεταπτ. φοιτητής -Τμ. Χημείας ΑΠΘ

9:30-9:45

Καθαρισμός βιοϊκριωμάτων με μοτίβα προσκόλλησης σε κύτταρα για εφαρμογή στην αναγέννηση οστού και χόνδρου

Αγλαΐα Μάντσου, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

9:45-10:00

Συστηματική ταυτοποίηση των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών στο *Thermus thermophilus HB8*

Βερόνικα Γιουρίεβα, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

10:00-10:15

IN VITRO και IN SILICO διερεύνηση του μηχανισμού πρόσδεσης ενός συμπλόκου V(IV) – κουρκουμίνης στην αλβουμίνη, το DNA και τη DNA γυράση και μελέτη της αιμοσυμβατότητας

Δημήτριος Αυγουλάς, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

10:15-10:30

10:30-10:45	<p>Ανάπτυξη αυτόματου συστήματος εκχύλισης προσρόφησης για τον προσδιορισμό του παλλαδίου σε καταλύτες αυτοκινήτων που βασίζεται σε <i>on-line</i> στήλη προσυγκέντρωσης πληρωμένη με ξύσματα- PTFE και φασματοσκοπία ατομικής απορρόφησης φλόγας</p> <p>Αντωνία Τζιλή, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	10:30-10:45
10:45-11:00	<p>Ανάπτυξη αυτόματης <i>on-line</i> μεθόδου εκχύλισης βασισμένη σε επικαλυμμένες ίνες υάλου και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας για τον προσδιορισμό τοξικών μετάλλων</p> <p>Ελένη Λαζαρίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>ΑΝΟΡΓΑΝΗ & ΒΙΟΑΝΟΡΓΑΝΗ ΧΗΜΕΙΑ- ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ <i>Προεδρείο: Κ. Δενδρινού-Σαμαρά, Καθηγήτρια, Θ. Λαζαρίδης, Επικ. Καθηγητής & Κ. Γιαννούση, Μεταδιδ. ερευνήτρια</i></p>	10:45-12:00
11:00-11:15	<p>Μικροεκχύλιση πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων από δείγματα νερού με κάψουλα και προσδιορισμός τους με Αέρια Χρωματογραφία-Φασματομετρία Μάζας</p> <p>Ναταλία Μανούση, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>Συγχορήγηση Νανοσωματιδίων-Αντιβιοτικών για εξειδικευμένες αντιμικροβιακές ιδιότητες</p> <p>Κλεονίκη Γιαννούση, Μεταδιδ. ερευνήτρια -Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	10:45-11:00
11:15-11:30	<p>Εφαρμογή της εκχύλισης με υφασμάτινο μέσο (FPSE) για την ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού έξι δισφαινολών και της διαιθυλοστιλβεστρόλης σε δείγματα ούρων με Υγρή Χρωματογραφία Υψηλής Πίεσης (HPLC) και ανιχνευτή παράταξης φωτοδιοδών (PDA)</p> <p>Βασίλειος Αλαμπάνος, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>Φωταυγή μεταλλοργανικά πλέγματα λανθανίδων ως εκπομποί λευκού φωτός</p> <p>Αθανασία Ψάλτη, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	11:00-11:15
11:30-11:45	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	<p>Ετεροληπτικά σύμπλοκα του αργύρου(I) με διφωσφίνες και ετεροκυκλικά θειοαμίδια: σύνθεση, κρυσταλλικές δομές, αντιβακτηριακή και αντικαρκινική δραστηριότητα</p> <p>Δέσποινα Βαρνά, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	11:15-11:30
		<p>Σύνθεση, χαρακτηρισμός και βιολογική δράση συμπλόκων ενώσεων του χαλκού(II) με μη-στεροειδή αντιφλεγμονώδη φάρμακα</p>	11:30-11:45

Γεώργιος Μάλης, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ

11:45-12:00	ΔΙΑΛΕΙΜΜΑ	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	11:45-12:00
12:00-13:30	ΤΟΞΙΚΟΛΟΓΙΑ-ΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ-ΕΛΕΓΧΟΣ ΠΟΙΟΤΗΤΑΣ ΦΑΡΜΑΚΩΝ <i>Προεδρείο: Ελένη Γκίκα, Επικ. Καθηγήτρια, Κων/νος Ζαχαρής, Επικ. Καθηγητής & Χριστίνα Βιργιλίου, Μεταδιδ. ερευνήτρια</i>	ΔΙΑΛΕΙΜΜΑ	12:00-12:15
12:00-12:15	Ανάπτυξη και επικύρωση αναλυτικής μεθόδου για τον προσδιορισμό της γεντοξικής πρόσμιξης, υδραζίνη, σε φαρμακευτικά σκευάσματα αλλοπουρινόλης με UHPLC-FLD Μαρλέν Χριστοφή, Μεταπτ.φοιτήτρια – Τμ. Φαρμακευτικής ΑΠΘ	ΤΡΟΦΙΜΑ <i>Προεδρείο: Νικόλαος Νενάδης, Επικ. Καθηγητής & Μαρία Παπαποστόλου, Υποψ. διδάκτορας</i>	12:15-14:45
12:15-12:30	Χρήση απλών οργανικών ενώσεων στη μελέτη διαπερατότητας φαρμάκων για ενδοκοιλιακή χορήγηση Ελένη Τσανακσίδου, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Φαρμακευτικής ΑΠΘ	Μελέτη της απελευθέρωσης διοξειδίου του άνθρακα από φρυγμένους куάμους καφέ Κωνσταντίνα Τυχάλα, Απόφοιτη Τμ. Χημείας ΑΠΘ	12:15-12:30
12:30-12:45	Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου HPLC-DAD για τον ταυτόχρονο ποσοτικό προσδιορισμό σουλφασαλαζίνης και οξικής υδροκορτιζόνης σε δισκία ελεγχόμενης αποδέσμευσης και ορθικά υπόθετα Βασίλειος Τσάμης, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Φαρμακευτικής ΑΠΘ	Παρακολούθηση μεταβολών στο χρώμα και την υφή επιτραπέζιας πράσινης ελιάς ποικιλίας Χαλκιδική μειωμένης αλατοπεριεκτικότητας κατά την αποθήκευση σε αρωματισμένο με αιθέρια έλαια παρθένο ελαιόλαδο Μαρία Παπαποστόλου, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	12:30-12:45
12:45-13:00	Βελτιστοποίηση μεθόδου προσδιορισμού της ελεύθερης κορτιζόλης με LC-MS σε πλάσμα κίρρωτικών ασθενών Μαρία Τσάμη, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Φαρμακευτικής ΑΠΘ	Παραλαβή και μελέτη φυσικοχημικών ιδιοτήτων πρωτεϊνικών παρασκευασμάτων από τις προνύμφες του <i>Tenebrio molitor</i> Αλκμήνη- Άννα Γκινάλη, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	12:45-13:00
13:00-13:15	Καινοτόμα παιδιατρικά σκευάσματα αμοξυκιλλίνης – ανάπτυξη & επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού της αμοξυκιλλίνης με την χρήση HPLC Αθηνά Κίκα & Σεραφίνα- Παναγιώτα Ντερέκα Προπτ. φοιτήτριες – Τμ. Φαρμακευτικής ΑΠΘ	Παραγωγή καινοτόμων ροφημάτων από υποπροϊόντα της παραγωγής καφέ με τη χρήση β-κυκλοδεξτρίνης Αναστασία Λούκρη, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Γεωπονίας ΑΠΘ	13:00-13:15

13:15-13:30	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	Διερεύνηση αξιοποίησης προϊόντων και παραπροϊόντων χυμοποίησης φρούτων λωτού (<i>Diospyros kaki cv. Jiro</i>) I. Αλκοολική ζύμωση συμπυκνωμένου χυμού με μικτή καλλιέργεια ζυμών & II. Ανάλυση του προφίλ των κύριων καροτενοειδών και πηκτίνης στο στερεό υπόλειμμα χυμοποίησης Δήμητρα Ζερκίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	13:15-13:30
ΟΡΓΑΝΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ- ΦΥΣΙΚΑ ΠΡΟΙΟΝΤΑ			
13:30-15:15	<i>Προεδρείο: Ιωάννης Λυκάκης, Αναπλ. Καθηγητής & Δημήτρης Γεωργαντάς, Μεταπτ. φοιτητής</i>		
13:30-13:45	Μελέτη της καταλυόμενης αντίδρασης τριών συστατικών για τη σύνθεση πυρρολο-παραγώγων των αμινοξέων Δημήτρης Γεωργαντάς, Μεταπτ. Φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Χαρακτηρισμός της χημικής σύστασης αλεύρων από προνύμφες και νύμφες <i>Hermetia illucens</i> (L.) (Diptera: Stratiomyidae) (black soldier fly) διαφορετικής φυλής Στέλλα Σαρηβασιλείου, Προπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	13:30-13:45
13:45-14:00	3,4- Συμπυκνωμένα N- ουχα ετεροκυκλικά παράγωγα κουμαρινών: Σύνθεση και βιολογικές ιδιότητες Ελένη Καπίδου, Προπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Θεωρητική μελέτη στην αέρια φάση της ικανότητας φυσικών διυδροξυ- και τριυδροξυ- βενζοϊκών οξέων να δεσμεύουν ελεύθερες ρίζες με απόδοση ατόμου υδρογόνου Νεφέλη Πετρίδη, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	13:45-14:00
14:00-14:15	Καταλυτική μελέτη σύνθεσης υποκατεστημένων N-αρυλομιδαζολίων από νιτρίλια και αμίνες Νικόλαος Σιακαβάρας, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Επιστημονικές και κοινωνικές προκλήσεις στον αγροδιατροφικό τομέα την εποχή της πανδημίας COVID-19 Ευάγγελος Βασιλείου, Γεώργιος Ιωάννου, Νεφέλη Πετρίδη & Ελπίδα Σφαιροπούλου Μεταπτ. φοιτήτριες/φοιτητές	14:00-14:30
14:15-14:30	Βελτιστοποιημένη σύνθεση δύο τμημάτων του ανθρακικού σκελετού των ακιλανολών A και B Θεοδώρα Αθανασιάδου, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	ΠΜΣ “Χημική Τεχνολογία & Βιομηχανικές Εφαρμογές” Τμ. Χημείας ΑΠΘ	
14:30-14:45	Σύνθεση 3-καρβοξυ-πυριδινών μέσω διαδοχικής υδροαμίνωσης/οξειδωτικής κυκλοποίησης προπαραγυλοεστέρων με προπαραγυλαμίνη καταλυόμενη από AuNPs Αλέξανδρος Μπένα, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	14:30-14:45

14:45-15:00	Αερόβια εποξειδωση αλκενίων καταλυόμενη από 2,5-δικετοπιπεραζίνη Μαρία Ορφανίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ		14:45-15:00
15:00-15:15	Συνθετικές προσεγγίσεις των φυσικών προϊόντων oleocanthal και inohanalactone Γεωργία Μπάγκαβου, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ		15:00-15:15
ΣΥΖΗΤΗΣΗ			
ΠΟΣΤΕΡ – ΣΥΖΗΤΗΣΗ			
15:15-16:00	Προεδρείο: Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου, Αναπτ. Καθηγήτρια, Ευφημία Χατζηδημητρίου, Επικ. Καθηγήτρια, Νατάσα Καλογιούρη, Μεταδιδακτ. Ερευνήτρια & Ναταλία Μανούση, Υποψ. διδάκτορας		15:15-16:00
16:00-18:00	ΧΗΜΕΙΑ & ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ- ΕΛΕΓΧΟΣ ΡΥΠΑΝΣΗΣ Προεδρείο: Δήμητρα Λαμπροπούλου, Αναπτ. Καθηγήτρια & Neda Malesic- Eleftheriadou, Υποψ. διδάκτορας	ΔΙΔΑΚΤΙΚΗ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ Προεδρείο: Παναγιώτης Γιαννακουδάκης, Καθηγητής & Ανδρέας Καργόπουλος, Μεταδιδακτ. ερευνητής	16:00-17:15
16:00-16:15	Προσδιορισμός και παρουσία οργανοφωσφορικών εστέρων σε δείγματα ξηρής απόθεσης στη Θεσσαλονίκη Ιωάννα Παντελάκη, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Πρόταση για τη διδασκαλία της ενότητας «Χημικές αντιδράσεις» μέσα στα πλαίσια του μαθήματος της Χημείας της Α' Λυκείου υπό το πρίσμα της διδακτικής προσέγγισης «μαθητής - μικρός ερευνητής» Ανδρέας Καργόπουλος, Μεταδιδακτ. ερευνητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	16:00-16:15
16:15-16:30	Ενώσεις αζώτου σε κολυμβητικές δεξαμενές Βαΐα Φαντίδου, Προπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Έρευνα Πεδίου Εφαρμογών της Επικοινωνίας της Επιστήμης Ευστράτιος Ασημέλλης, Υποψ. διδάκτορας- Τμ. Χημείας ΑΠΘ	16:15-16:30
16:30-16:45	Προσδιορισμός μικροπλαστικών σε αμώδεις παραλίες στην ευρύτερη παράκτια περιοχή της Θεσσαλονίκης Δημήτριος Καλαρώνης, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Διερεύνηση ιδεαλιστικών αντιλήψεων μαθητών λυκείου-συσχέτιση με το επίπεδο γνώσεων στις φυσικές επιστήμες Κυριακή Κεσίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	16:30-16:45
16:45-17:00	Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φαρμακευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση υγρής χρωματογραφίας-φασματομετρίας μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας Κυριακή Αναγνωστοπούλου, Μεταπτ. φοιτήτρια -Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Εξέλιξη των ιδεών φοιτητών χημείας σχετικά με την απεικόνιση μιας χημικής αντίδρασης Χρήστος Παπαδόπουλος, Υποψ. διδάκτορας- Τμ. Χημείας ΑΠΘ	16:45-17:00

17:00-17:15	<p>Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φυτοπροστατευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση Υγρής Χρωματογραφίας Φασματομετρία Μάζας Υψηλής Διακριτικής Ικανότητας</p> <p>Στυλιανή Πετρομελίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια – Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	17:00-17:15
17:15-17:30	<p>Φωτοκαταλυτική διάσπαση της αντικαταθλιπτικής φαρμακευτικής ουσίας “Βενλαφαζίνη” σε υδατικά διαλύματα με χρήση οργανομεταλλικού καταλύτη. Μελέτη κινητικής και εκτίμηση τοξικότητας</p> <p>Αικατερίνη Οικονόμου, Προπτ. φοιτήτρια -Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>ΦΥΣΙΚΗ- ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ- ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΧΗΜΕΙΑ <i>Προεδρείο: Αγγελική Μπαντή, Μεταδιδακτ. ερευνήτρια & Αιμιλία Παπασούλη, Υποψ. διδάκτορας</i></p>	17:15-19:45
17:30-17:45	<p>Simultaneous removal of anti-inflammatory pharmaceutical compounds from an aqueous mixture with adsorption onto chitosan zwitterionic derivative</p> <p>Neda Malesic- Eleftheriadou, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>Ηλεκτροχημική οξείδωση Cr(III) από προσομοιωμένα και πραγματικά απόβλητα βυρσοδεψίων σε ηλεκτρόδια PbO₂</p> <p>Αναστάσιος- Ορέστης Γραμμένος, Μεταπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	17:15-17:30
17:45-18:00	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	<p>Έκλυση Οξυγόνου/Οξείδωση Νερού σε ηλεκτρόδια σκόνης και νανοσωλήνων TiO₂</p> <p>Όλγα Σπυρίδου, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	17:30-17:45
18:00-19:45	<p>ΧΗΜΙΚΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ- ΠΡΑΣΙΝΗ ΧΗΜΕΙΑ- ΥΛΙΚΑ <i>Προεδρείο: Δημήτριος Γκιλιόπουλος, Μεταδιδακτ. ερευνητής & Χριστίνα & Παππά, Υποψ. διδάκτορας</i></p>	<p>Ηλεκτροχημική και αντιδιαβρωτική ικανότητα σύνθετων υλικών της πολυανιλίνης με εσωτερική πρόσμειξη σε ανοξείδωτο χάλυβα</p> <p>Δήμητρα Παπαμιχαήλ, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	17:45-18:00
18:00-18:15	<p>Παρακολούθηση του ρυθμού λέπτυνσης κυρτών υγρών υμενίων ως δείκτη για την αξιολόγηση της σταθερότητας αφρών</p> <p>Άγγελος Ζαμάνης, Υποψ. διδάκτορας – Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	<p>Επίδραση των Ιόντων Βρωμίου στη Σταθερότητα του Ανοδικού Οξειδίου του Τανταλίου</p> <p>Χρυσάνθη Γκίλη, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ</p>	18:00-18:15

18:15-18:30	Σχεδιασμός στήλης επίπλευσης εξοπλισμένης με γεννήτρια μικροφουσσαλίδων για ανάκλαση λεπτών σωματιδίων μαγνησίτη Πολυξένη Τσαβέ, Υποψ. διδάκτορας -Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Ανάπτυξη και μελέτη διατάξεων ηλεκτρόλυσης νερού τύπου πολυμερικής μεμβράνης Νικόλαος Βασιλείου, Μεταπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	18:15-18:30
18:30-18:45	Απομάκρυνση χρωμικών ιόντων από υδατικά διαλύματα με χρήση πυριτίας τροποποιημένης με πολυαιθυλιμίνη Μαρία Ξανθοπούλου, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Μοριακά υποστυλωμένο γραφένιο με ομάδες πρόσδεσης διθιολενίων και διαμινών Αιμιλία Παπασούλη, Υποψ. διδάκτορας-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	18:30-18:45
18:45-19:00	Καταλυτική μετατροπή λιγνίνης προς παραγωγή φαινολικών και αρωματικών ενώσεων Φωτεινή Ζορμπά, Μεταπτ. φοιτήτρια-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Θεωρητική μελέτη της επίδρασης επιφανειακής ήρανοποίησης και προσθήκης οργανικών λειτουργικών ομάδων σε αμιγή συστήματα κβαντικών τελειών πυριτίου και γερμανίου Γεώργιος Εμμανουηλίδης, Προπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	18:45-19:00
19:00-19:15	Τεχνο-οικονομική ανάλυση και εκτίμηση βιωσιμότητας αξιοποίησης της λιγνίνης μέσω (καταλυτικής) πυρόλυσης προς χημικές ενώσεις υψηλής προστιθέμενης αξίας Γεώργιος Ιακώβου, Μεταπτ. φοιτητής – Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Προσδιορισμός του σχήματος και του μεγέθους μικκυλίων SDS σε υδατικά διαλύματα αλάτων και μετρήσεις ιξώδους Αθανάσιος Μπουρμπούλιας, Προπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	19:00-19:15
19:15-19:30	Χαρακτηρισμός και αξιοποίηση βιομάζας μικροφυκών για την παραγωγή βιοκαυσίμων Σάββας Καβούκης, Μεταπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	Επίδραση των στρατοσφαιρικών συνθηκών στη διάχυση των φθοροχλωρανθράκων στον αέρα Νικόλαος Ιακωβάκης, Προπτ. φοιτητής-Τμ. Χημείας ΑΠΘ	19:15-19:30
19:30-19:45	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	ΣΥΖΗΤΗΣΗ	19:30-19:45

20:00**ΤΕΛΕΤΗ ΛΗΞΗΣ****20:00**

Πίνακας περιεχομένων

Πρόλογος.....	i
ΜΕΡΟΣ Ι. ΠΕΡΙΛΗΨΕΙΣ ΠΡΟΦΟΡΙΚΩΝ ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΩΝ.....	
Αρχαιομετρικές μελέτες ραδιοχρονολόγησης με τη μέθοδο ουρανίου-μολύβδου.....	1
Προσδιορισμός της ιστιδίνης σε βιολογικά δείγματα με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής και εκλεκτική εν-ροή αντίδραση μετά την στήλη (HPLC-PCD).....	2
Παραγωγοποίηση μετά τη στήλη σε συνδυασμό με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής (HPLC-PCD) για τον προσδιορισμό της ισταμίνης και της ιστιδίνης σε δείγματα τροφίμων	3
Αυτόματη μέθοδος προσδιορισμού του μολύβδου σε πολύ μικρές συγκεντρώσεις σε δείγματα μπύρας με την τεχνική έγχυσης σε ροή (FIA) και On-line εκχύλιση στερεάς φάσης με μικροστήλη προσυγκέντρωσης Oasis TM -HLB και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης.	4
Ανάπτυξη αυτόματου συστήματος εκχύλισης προσρόφησης για τον προσδιορισμό του παλλαδίου σε καταλύτες αυτοκινήτων που βασίζεται σε on-line στήλη προσυγκέντρωσης πληρωμένη με ξύσματα-PTFE και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας.....	5
Ανάπτυξη αυτόματης on-line μεθόδου εκχύλισης βασισμένη σε επικαλυμμένες ίνες υάλου και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας για τον προσδιορισμό τοξικών μετάλλων.....	6
Μικροεκχύλιση πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων από δείγματα νερού με κάψουλα και προσδιορισμός τους με αέρια χρωματογραφία-φασματομετρία μάζας.....	7
Εφαρμογή της εκχύλισης με υφασμάτινο μέσο (FPSE) για την ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού εχι δισφαινολών και της διαιθυλοστιλβεστρόλης σε δείγματα ούρων με υγρή χρωματογραφία υψηλής πίεσης (HPLC) και ανιχνευτή παράταξης φωτοδιόδων (PDA)	8
Συγχορήγηση Νανοσωματιδίων-Αντιβιοτικών για εξειδικευμένες αντιμικροβιακές ιδιότητες.....	9
Φωταυγή μεταλλοργανικά πλέγματα λανθανίδων ως εκπομποί λευκού φωτός.....	10
.Ετεροληπτικά σύμπλοκα του αργύρου(I) με διφωσφίνες και ετεροκυκλικά θειοαμίδια: σύνθεση, κρυσταλλικές δομές, αντιβακτηριακή και αντικαρκινική δραστηριότητα.....	11
Σύνθεση, χαρακτηρισμός και βιολογική δράση συμπλόκων ενώσεων του χαλκού(II) με μη-στεροειδή αντιφλεγμονώδη φάρμακα	12
De novo σύνθεση γενετικών αλληλουχιών για recombinamers.....	13
Καθαρισμός βιοϊκρωμάτων με μοτίβα προσκόλλησης σε κύτταρα για εφαρμογή στην αναγέννηση οστού και χόνδρου	14
Συστηματική ταυτοποίηση των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών στο <i>Thermus thermophilus</i> HB8	15
<i>In vitro</i> και <i>in silico</i> διερεύνηση του μηχανισμού πρόσδεσης ενός συμπλόκου V(IV) – κουρκουμίνης στην αλβουμίνη, το DNA και τη DNA γυράση και μελέτη της αιμοσυμβατότητας.....	16
Πρόταση για τη διδασκαλία της ενότητας «Χημικές αντιδράσεις» μέσα στα πλαίσια του μαθήματος της Χημείας της Α' Λυκείου υπό το πρίσμα της διδακτικής προσέγγισης «μαθητής - μικρός ερευνητής»	17
Έρευνα πεδίου εφαρμογών της Επικοινωνίας της Επιστήμης	18

Διερεύνηση ιδεαλιστικών αντιλήψεων μαθητών λυκείου – Συσχέτιση με το επίπεδο γνώσεων στις Φυσικές Επιστήμες.....	19
Εξέλιξη των ιδεών φοιτητών χημείας σχετικά με την απεικόνιση μιας χημικής αντίδρασης	20
Μελέτη της καταλυόμενης αντίδρασης τριών συστατικών για τη σύνθεση πυρρολο-παραγώγων των αμινοξέων	21
3,4-συμπυκνωμένα N-ούχα ετεροκυκλικά παράγωγα κουμαρινών: Σύνθεση και βιολογικές ιδιότητες	22
Καταλυτική μελέτη σύνθεσης υποκατεστημένων N-αρυλοιμιδαζολίων από νιτρίλια και αμίνες.....	23
Βελτιστοποιημένη σύνθεση δύο τμημάτων του ανθρακικού σκελετού των Ακιλανολών Α και Β	24
Σύνθεση 3-καρβοξυ-πυριδινών μέσω διαδοχικής υδροαμίνωσης/οξειδωτικής κυκλοποίησης προπαργυλο εστέρων με προπαργυλαμίνη καταλυόμενη από AuNPs	25
Αερόβια εποξείδωση αλκενίων καταλυόμενη από 2,5-δικετοπιπεραζίνη	26
Συνθετικές προσεγγίσεις των φυσικών προϊόντων oleoanthal και inohanalactone	27
Ηλεκτροχημική οξείδωση Cr(III) από προσομοιωμένα και πραγματικά απόβλητα βυρσοδεψίων σε ηλεκτρόδια PbO ₂	28
Έκλυση οξυγόνου/οξείδωση νερού σε ηλεκτρόδια σκόνης και νανοσωλήνων TiO ₂	29
Ηλεκτροχημική και αντιδιαβρωτική ικανότητα σύνθετων υλικών της πολυανιλίνης με εσωτερική πρόσμειξη σε ανοξειδωτο χάλυβα	30
Επίδραση των Ιόντων Βρωμίου στη Σταθερότητα του Ανοδικού Οξειδίου του Τανταλίου.....	31
Ανάπτυξη και μελέτη διατάξεων ηλεκτρόλυσης νερού τύπου πολυμερικής μεμβράνης	32
Μοριακά Υποστυλωμένο Γραφένιο με Ομάδες Πρόσδεσης Διθιολενίων και Διαμινών	33
Θεωρητική Μελέτη της Επίδρασης Επιφανειακής Αδρανοποίησης και Προσθήκης Οργανικών Λειτουργικών Ομάδων σε Αμιγή Συστήματα Κβαντικών Τελείων Πυριτίου και Γερμανίου	34
Προσδιορισμός του σχήματος και του μεγέθους μικκυλίων SDS σε υδατικά διαλύματα αλάτων με μετρήσεις ιζώδους	35
Επίδραση των Στρατοσφαιρικών Συνθηκών στη Διάχυση των Φθοροχλωρανθράκων στον Αέρα.....	36
Ανάπτυξη και επικύρωση αναλυτικής μεθόδου για τον προσδιορισμό της γενotoξικής πρόσμειξης, υδραζίνης, σε φαρμακευτικά σκευάσματα αλλοπουρινόλης με UHPLC-FLD	37
Χρήση απλών οργανικών ενώσεων στη μελέτη διαπερατότητας φαρμάκων για ενδοκολπική χορήγηση 38	
Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου HPLC-DAD για τον ταυτόχρονο ποσοτικό προσδιορισμό σουλφασαλαζίνης και οξικής υδροκορτιζόνης σε δισκία ελεγχόμενης αποδέσμευσης και ορθικά υπόθετα	39
Βελτιστοποίηση μεθόδου προσδιορισμού της ελεύθερης κορτιζόλης με LC-MS σε πλάσμα κίρρωτικών ασθενών	40
Καινοτόμα παιδιατρικά σκευάσματα αμοξικιλίνης – Ανάπτυξη & επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού της αμοξικιλίνης με τη χρήση HPLC.....	41
Προσδιορισμός και παρουσία οργανοφωσφορικών εστέρων σε δείγματα ξηρής απόθεσης στη Θεσσαλονίκη	42
Ενώσεις αζώτου σε κολυμβητικές δεξαμενές	43

Προσδιορισμός μικροπλαστικών σε αμμώδεις παραλίες στην ευρύτερη παράκτια περιοχή της Θεσσαλονίκης.....	44
Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φαρμακευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση υγρής χρωματογραφίας-φασματομετρίας μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας	45
Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φυτοπροστατευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση υγρής χρωματογραφίας φασματομετρία μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας.....	46
Φωτοκαταλυτική διάσπαση της αντικαταθλιπτικής φαρμακευτικής ουσίας «Βενλαφαξίνη» σε υδατικά διαλύματα με χρήση οργανομεταλλικού καταλύτη. Μελέτη κινητικής και εκτίμηση τοξικότητας.	47
Simultaneous removal of anti-inflammatory pharmaceutical compounds from an aqueous mixture with adsorption onto chitosan zwitterionic derivative	48
Βιοεκτυπώσιμα πολυμερικά ικριώματα χιτοζάνης-πηκτίνης με αυξημένη βιοπροσκόλληση κυττάρων για εφαρμογές στην ανάπλαση δέρματος.....	49
Σύνθεση και μελέτη συμπολυμερών πολυ(γαλακτικού οξέος)- πολυ(αδιπτικού αιθυλενεστέρα) με την τεχνική ανάμιξης τήγματος για ενθυλάκωση αντικαρκινικών φαρμάκων.	50
Παρασκευή και μελέτη ιδιοτήτων φιλμ πολυ(γαλακτικού οξέος) με νανοσωματίδια χιτοζάνης-ενθυλακκωμένου αιθέριου ελαίου ρίγανης	51
Σύνθεση και χαρακτηρισμός νανοσύνθετων υλικών του πολυ(γαλακτικού οξέος), PLA, με νανοσωματίδια Ag, TiO ₂ ή ZnO.....	52
Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοσυμβατής υδρογέλης Pluronic με φυσικά πολυμερή για 3D εκτύπωση .	53
Παρασκευή και μελέτη συμπολυμερών πολυ(βανιλικού αιθυλενεστέρα) -πολυ(φουρανικού αιθυλενεστέρα).	54
Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με δύο ενεργές ομάδες πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού	55
Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με μια ενεργό ομάδα πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού	56
Κινητική πολυμερισμού κυανοακρυλικής κόλλας για την αποκατάσταση γυάλινων επιφανειών, με την Φασματοσκοπία Υπερύθρου.....	57
Μελέτη της απελευθέρωσης διοξειδίου του άνθρακα από φρυγμένους κυάμους καφέ.....	58
Παρακολούθηση μεταβολών στο χρώμα και την υφή επιτραπέζιας πράσινης ελιάς ποικιλίας Χαλκιδική μειωμένης αλατοπεριεκτικότητας κατά την αποθήκευση σε αρωματισμένο με αιθέρια έλαια παρθένο ελαιόλαδο	59
Παραλαβή και μελέτη φυσικοχημικών ιδιοτήτων πρωτεϊνικών παρασκευασμάτων από τις προνύμφες του <i>Tenebrio molitor</i>	60
Παραγωγή καινοτόμων ροφημάτων από υποπροϊόντα της παραγωγής καφέ με τη χρήση β-κυκλοδεξτρίνης.....	61
Διερεύνηση αξιοποίησης προϊόντων και παραπροϊόντων χυμοποίησης φρούτων λωτού (<i>Diospyros kaki</i> cv. Jiro). I.Αλκοολική ζύμωση συμπυκνωμένου χυμού με μικτή καλλιέργεια ζυμών & II. Ανάλυση του προφίλ των κύριων καρτενοειδών και πηκτίνης στο στερεό υπόλειμμα χυμοποίησης.....	62
Χαρακτηρισμός της χημικής σύστασης αλεύρων από προνύμφες και νύμφες <i>Hermetia illucens</i> (L.) (Diptera: Stratiomyidae) (black soldier fly) διαφορετικής φυλής.....	63

Θεωρητική μελέτη στην αέρια φάση της ικανότητας φυσικών διυδροξυ – και τριυδροξυ - βενζοϊκών οξέων να δεσμεύουν ελεύθερες ρίζες με απόδοση ατόμου υδρογόνου	64
Επιστημονικές και κοινωνικές προκλήσεις στον αγροδιατροφικό τομέα την εποχή της πανδημίας COVID-19 με τη ματιά των μ/κων φοιτητών της ειδίκευσης 'Χημεία, Τεχνολογία και Έλεγχος Τροφίμων Και Ζωοτροφών' (Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ).....	65
Παρακολούθηση του ρυθμού λέπτυνσης κυρτών υγρών υμενίων ως δείκτη για την αξιολόγηση της σταθερότητας αφρών.....	66
Σχεδιασμός στήλης επίπλευσης εξοπλισμένης με γεννήτρια μικροφουσαλίδων για ανάκτηση λεπτών σωματιδίων μαγνησίτη	67
Απομάκρυνση χρωμικών ιόντων από υδατικά διαλύματα με χρήση πυριτίας τροποποιημένης με πολυαιθυλενιμίνη.....	68
Καταλυτική μετατροπή λιγνίνης προς παραγωγή φαινολικών και αρωματικών ενώσεων	69
Τεχνο-οικονομική ανάλυση και εκτίμηση βιωσιμότητας αξιοποίησης της λιγνίνης μέσω (καταλυτικής) πυρόλυσης προς χημικές ενώσεις υψηλής προστιθέμενης αξίας	70
Χαρακτηρισμός και αξιοποίηση βιομάζας μικροφυκών για την παραγωγή βιοκαυσίμων	71
ΜΕΡΟΣ II. ΠΕΡΙΛΗΨΕΙΣ ΑΝΑΡΤΗΜΕΝΩΝ ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΩΝ.....	
ΠΟ-1. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό και την ποσοτικοποίηση 34 δραστικών ουσιών για παθήσεις του κεντρικού νευρικού συστήματος, σε ξηρά κηλίδα αίματος, με υγρή χρωματογραφία υπερυψηλής απόδοσης αντίστροφης φάσης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας σε σειρά (UPLC-MS/MS).....	73
ΠΟ-2. Αυτόματος φθορισμομετρικός προσδιορισμός της ιστιδίνης σε δείγματα ούρων με την τεχνική των διαδοχικών εγχύσεων (ZF)	74
ΠΟ-3. Εν-ροή αντίδραση της ομοκυστεΐνης με την ο-φθαλαλδεΐδη σε ισχυρά αλκαλικό περιβάλλον: φθορισμομετρικός προσδιορισμός με την τεχνική των διαδοχικών εγχύσεων (ZF).....	75
ΠΟ-4. Δημιουργία in house βιβλιοθήκης HPLC χρωματογραφημάτων και QTOF-MS φασμάτων με τη χρήση πρότυπων ενώσεων της εταιρείας Merck	76
ΠΟ-5. Ανάπτυξη χρωματογραφικών μεθόδων για τη μελέτη της αυθεντικότητας των ξηρών καρπών σε συνδυασμό με χημειομετρικά εργαλεία	77
ΠΟ-6. Ανάπτυξη ηλεκτροχημικού αισθητήρα ανίχνευσης βιοδεικτών της νόσου με οσμή των ούρων σαν σιρόπι σφενδάμου (MSUD) σε μορφοποιημένα ηλεκτρόδια πάστας άνθρακα με σαφράν συζευγμένο με νανοσωματίδια αργύρου	78
ΠΟ-7. Μεταβολομική ανάλυση νευρικών προγονικών κυττάρων μετά από επίδραση με κοκαΐνη	79
ΠΟ-8. Ανάπτυξη μεθόδου μικροεκχύλισης στερεάς φάσης υπερκείμενου χώρου σε συνδυασμό με αέρια χρωματογραφία συζευγμένη με φασματομετρία μάζας (HS-SPME-GC-MS) για τη μη στοχευμένη ανάλυση πτητικών ενώσεων του ελαιόλαδου	80
ΠΟ-9. Ανάπτυξη μεθόδου αέριας χρωματογραφίας-φασματομετρίας μαζών έπειτα από εκχύλιση των συστατικών με την τεχνική μικροεκχύλισης στερεάς φάσης για την ανάλυση πτητικών ενώσεων επιτραπέζιας ελιάς. Μελέτη της πορείας ζύμωσης επιτραπέζιων ελιών Χαλκιδικής.....	81
ΠΟ-10. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού έξι β-αναστολέων σε ορό αίματος και σε δείγματα ούρων με UHPLC-MS/MS, μετά από εκχύλιση FPSE.....	82

ΠΟ-11. Μέθοδος προσδιορισμού θρεπτικών και τοξικών στοιχείων σε καραμέλες και ζαχαρωτά με την τεχνική ICP-AES	83
ΠΟ-12. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό και την απόλυτη ποσοτικοποίηση 15 ακυλοκαρνιτινών, σε ορό αίματος, με χρωματογραφία υδρόφιλης αλληλεπίδρασης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας σε σειρά (HILIC-MS/MS)	84
ΠΟ-13. Ανάπτυξη μεθόδου για τον προσδιορισμό οργανικών οξέων σε ούρα με GC-MS/MS	85
ΠΟ-14. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό φαινυλεφρίνης σε ξηρές κηλίδες αίματος, με χρωματογραφία υδρόφιλων αλληλεπιδράσεων συζευγμένη με φασματομετρία μάζας σε σειρά (HILIC-MS/MS)	86
ΠΟ-15. Ανάπτυξη ομογενούς εκχύλισης υγρού- υγρού για τον προσδιορισμό δοξορουβικίνης σε δείγματα ούρων με χρωματογραφία υγρού υπερυψηλής πίεσης με φθορισμομετρική ανίχνευση	87
ΠΟ-16. Μελέτη της καταλυτικής οξειδωσης της 2'-δεοξυγουανωσίνης από το Mo2C παρουσία H2O2	88
ΠΟ-17. Μελέτη προσδιορισμού των επιπέδων της γεμισταβίνης στον ορό μυών και επίμυων χρησιμοποιώντας υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης (HPLC).....	89
ΠΟ-18. Σύνθεση και χαρακτηρισμός ενός νέου τύπου ετεροπολυοξομολυβδαινικού ανιόντος και εφαρμογή του στην παραγωγή 1O2 για την οξείδωση αλκενίων	90
ΠΟ-19. Σύνθεση, χαρακτηρισμός και βιολογική δράση συμπλόκων ενώσεων του Έρβιου (er) με υποκατεστημένες σαλικυλαλδεΐδες.....	91
ΠΟ-20. Μαγνητο-φθορίζοντα νανοσύνθετα: Σύνθεση, χαρακτηρισμός, εφαρμογή επαγόμενης μαγνητικής υπερθερμίας	92
ΠΟ-21. Μεταλλοργανικά πλέγματα του Zr4+ ως φωταυγών αισθητήρων ιόντων Pb2+ και Cu2+σε υδατικά διαλύματα.....	93
ΠΟ-22. Σύμπλοκα του Cu(II) με 5-φθόρο-σαλικυλαλδεΐδη και παράγωγα 1,10-φαινανθρολίνης: Σύνθεση, χαρακτηρισμός της δομής και αλληλεπίδραση με calf-thymus DNA και αλβουμίνες.....	94
ΠΟ-23. Επικαλυμμένα νανοσωματίδια ZnO: Σολβοθερμική σύνθεση, χαρακτηρισμός, in vitro μελέτη της πρωτεϊνικής αμυλοείδωσης της ινσουλίνης	95
ΠΟ-24. Σύνθεση, χαρακτηρισμός και μελέτη της βιολογικής δράσης ενώσεων συναρμογής του χαλκού(II) με την 5-φθόρο-σαλικυλαλδεΐδη	96
ΠΟ-25. Σύνθεση και χαρακτηρισμός επικαλυμμένων ZnO NPs υποψήφια για φορείς φαρμάκων	97
ΠΟ-26. Σύμπλοκες ενώσεις του κοβαλτίου με σαλικυλαλδεΐδες: Σύνθεση, χαρακτηρισμός της δομής και μελέτη της βιολογικής δράσης	98
ΠΟ-27. Σύνθεση, κρυσταλλικές δομές και φωτοφυσικά χαρακτηριστικά φωταυγών πολυπυρηνικών συμπλόκων του χαλκού(I) με διφωσφίνες και πολυδραστικά ανιόντα καρβοξυλικών οξέων.....	99
ΠΟ-28. Σύνθεση ενός φθορίζοντος μεταλλοργανικού πλέγματος Zr4+ και μελέτη του ως φωταυγούς αισθητήρα για την ανίχνευση πικρικού οξέος στο νερό.....	100
ΠΟ-28α. Διπυρηνικά σύμπλοκα του Cu(I) και Ag(I) με φωσφίνες και γέφυρα 1,1'-(1,4-phenylene) bis(N-(pyridin-2-ylmethylene)methanamine).....	101
ΠΟ-28B. Διπυρηνικά σύμπλοκα του Cu(I) και Ag(I) με το ligand 3-(2-pyridyl)-5,6-diphenyl-1,2,4-triazine και γέφυρα διφωσφίνης.....	102
ΠΟ-29. Καταλυτικές διεργασίες σύνθεσης N-αρυλο υδροξυλαμινών και N-ετεροκυκλικών ενώσεων με τη χρήση νανοσωματιδίων των μετάλλων.....	103

ΠΟ-30. Θερμικές και καταλυτικές αντιδράσεις παγίδευσης της ινδανδιονοκετένης με α,β-ακόρεστες ιμινο-ενώσεις.....	104
ΠΟ-31. Επίδραση της συγκέντρωσης φορέων φορτίου στο δυναμικό κατάρρευσης των οξειδίων νιοβίου σε διάλυμα ιόντων βρωμίου	105
ΠΟ-32. Σύνθεση και χαρακτηρισμός καινοτόμων νανοσύνθετων πολυεστέρων: συνδυάζοντας νανοάργιλους με τον βιοπροερχόμενο πολυ(2,5-φουρανικό βουτυλενεστέρα).....	106
ΠΟ-33. Σύνθεση νέων σύνθετων βιοπολυμερών της χιτοζάνης με προσθήκη κρόκου ή κουρκουμά και μελέτη των ιδιοτήτων τους	107
ΠΟ-34. Σύνθεση και χαρακτηρισμός υδροπηγμάτων μεθακρυλικών εστέρων της πολυαιθυλενογλυκόλης (PEG) ανταποκρινόμενων σε μεταβολές του pH και της θερμοκρασίας	108
ΠΟ-35. Εκτίμηση της ολικής αντιοξειδωτικής δράσης εδώδιμου αβοκαντελαίου με εφαρμογή της δοκιμής δέσμευσης DPPH· και διερεύνηση της συνεισφοράς επιμέρους συστατικών του.....	109

Πρόλογος

Το Συνέδριο Χημείας Μεταπτυχιακών και Προπτυχιακών Φοιτητών του ΑΠΘ διοργανώνεται από μέλη ΔΕΠ, ΕΔΙΠ, ΕΤΕΠ αλλά και μεταδιδακτορικούς ερευνητές του ΑΠΘ σε συνεργασία με μέλη του ΠΚΤΔΜ της ΕΕΧ και του ΣΧΒΕ. Το επιστημονικό πρόγραμμα του 4^{ου} συνεδρίου διαμόρφωσαν συνολικά 71 προφορικές παρουσιάσεις και 37 αναρτημένες ανακοινώσεις τις οποίες παρουσίασαν μεταδιδακτορικοί ερευνητές, υποψήφιοι διδάκτορες, μεταπτυχιακοί και προπτυχιακοί φοιτητές του Τμήματος Χημείας αλλά και των Τμημάτων Φαρμακευτικής, Ιατρικής και Γεωπονικής Σχολής του ΑΠΘ, στη διάρκεια συνολικά 12 συνεδριών που έλαβαν χώρα στις 20 & 21-03-2021.

Μέρος Ι. Περιλήψεις Προφορικών Παρουσιάσεων

Αρχαιομετρικές μελέτες ραδιοχρονολόγησης με τη μέθοδο ουρανίου-μολύβδου

Ευσταθία Βουζαξάκη, Γεώργιος Ζαχαριάδης

*Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Κ.
54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα*

email: efstavou@gmail.com, zacharia@chem.auth.gr

Με αφετηρία την εξέλιξη της αρχαιομετρίας και τη σχετική βιβλιογραφική ανασκόπηση, παρουσιάζονται οι διάφορες μέθοδοι που αναπτύχθηκαν εστιάζοντας στη χρονολόγηση με τη μέθοδο ουρανίου-μολύβδου και τη συμβολή της Αναλυτικής Χημείας σε αυτή. Αναφέρονται οι βασικές αρχές των μεθόδων που εφαρμόζονται για τη χρονολόγηση των υλικών ενώ γίνεται ιδιαίτερη αναφορά στη ραδιοχρονολόγηση καθώς και στις αρχές της ραδιοχημείας που τη διέπουν. Επίσης μελετάται η μέθοδος ραδιοϊσοτοπικής χρονολόγησης ουρανίου-μολύβδου μέσω της ιστορικής εξέλιξης της και οι βασικές αρχές στις οποίες βασίζεται. Εκτός από τα ορυκτά που χρονολογούνται με τη συγκεκριμένη μέθοδο, αναφέρονται και οι πιο σημαντικές εφαρμογές που έχουν λάβει χώρα μέσα στα χρόνια καθώς και τα πλεονεκτήματα και οι αδυναμίες της μεθόδου. Τέλος, παρουσιάζονται οι τρεις βασικότερες αναλυτικές τεχνικές (LA-ICP-MS, SIMS, ID-TIMS) που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο ουρανίου-μολύβδου και οι οποίες συμβάλλουν στον υπολογισμό των ηλικιών των υλικών. Δίνεται ιδιαίτερη έμφαση στις αρχές λειτουργίας, στην οργανολογία αλλά και στη πειραματική διαδικασία που ακολουθείται σε κάθε τεχνική. Η σύγκριση μεταξύ των τεχνικών αναδεικνύει τα πλεονεκτήματα και τις αδυναμίες της καθεμίας και έτσι είναι πιο εύκολο να επιλεγεί κάποια από αυτές ανάλογα με τα δεδομένα και το ζητούμενο κάθε φορά.

Προσδιορισμός της ιστιδίνης σε βιολογικά δείγματα με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής και εκλεκτική εν-ροή αντίδραση μετά την στήλη (HPLC-PCD)

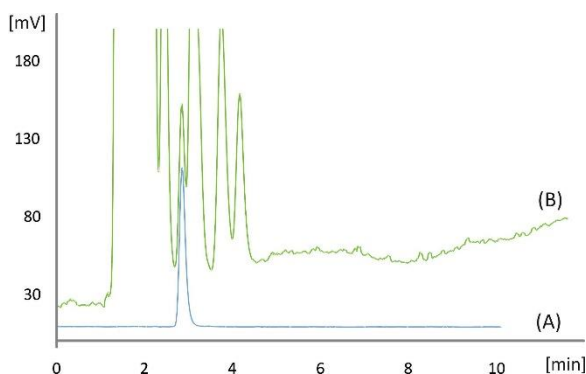
Ειρήνη Σταμπίνα¹, Αποστολία Τσιασιώτη¹, Καλλιόπη Κληματσάκη²,
Κωνσταντίνος Ζαχαρής³, Παρασκευάς Τζαναβάρας¹

¹ Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
ptzanava@chem.auth.gr, eirinistampina@gmail.com

² Γενικό Νοσοκομείο Κορίνθου, Λ. Αθηνών, Κόρινθος

³ Τμήμα Φαρμακευτικής, Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

Στην παρούσα εργασία περιγράφεται η ανάπτυξη μιας νέας μεθόδου για τον εκλεκτικό προσδιορισμό της ιστιδίνης σε βιολογικά δείγματα. Ο διαχωρισμός της ιστιδίνης από το υπόστρωμα πραγματοποιείται με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής και έπειτα από εν-ροή παραγωγοποίησή της, μετά την στήλη, ανιχνεύεται φθορισμομετρικά. Η αντίδραση της ιστιδίνης με το αντιδραστήριο παραγωγοποίησης, ο-φθαλαδιαλδεΰδη, λαμβάνει χώρα χωρίς την παρουσία πυρηνόφιλων αντιδραστηρίων, προσφέροντας εκλεκτικότητα για τον προσδιορισμό της ιστιδίνης σε πολύπλοκα βιολογικά υποστρώματα. Η γραμμικότητα κυμάνθηκε μεταξύ 500 – 25000 nmol L⁻¹ με όριο ανίχνευσης 160 nmol L⁻¹. Η επίδραση του υποστρώματος ήταν χαμηλή (<5 %) και η ανάλυση των δειγμάτων πραγματοποιήθηκε μετά από ελάχιστη προκατεργασία. Η ενδογενής ιστιδίνη προσδιορίστηκε σε ορό αίματος σε επίπεδα από 78 – 119 μmol L⁻¹ και σε τυχαία δείγματα ούρων σε επίπεδα μεταξύ 266 – 2034 μmol L⁻¹. Τα ποσοστά ανάκτησης ήταν ικανοποιητικά σε όλες τις περιπτώσεις και κυμάνθηκαν από 89 έως 114 %.



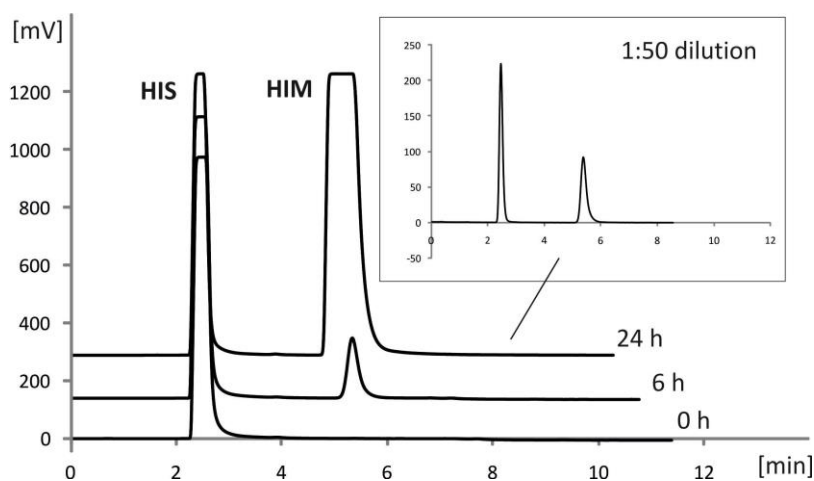
Αντιπροσωπευτικά χρωματογραφήματα από την ανάλυση ανθρώπινου ορού αίματος με (A) την προτεινόμενη μέθοδο HPLC-PCD και (B) χρησιμοποιώντας μη εκλεκτική αντίδραση PCD (RA = 2 mmol L⁻¹ OPA και RB = 5 mmol L⁻¹ N-ακετυλοκυστεΐνη σε 100 mmol L⁻¹ borate buffer (pH = 10), $\lambda_{ex} / \lambda_{em} = 340/460$ nm).

Παραγωγοποίηση μετά τη στήλη σε συνδυασμό με χρωματογραφία κατιοντοανταλλαγής (HPLC-PCD) για τον προσδιορισμό της ισταμίνης και της ιστιδίνης σε δείγματα τροφίμων

Αποστολία Τσιασιώτη, Παρασκευάς Τζαναβάρας

Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
atsiasioti@gmail.com, ptzanava@chem.auth.gr

Η ισταμίνη είναι μια βιογενής αμίνη, η οποία παράγεται από το αμινοξύ ιστιδίνη και είναι δείκτης φρεσκότητας αρκετών τροφίμων. Έτσι, ο ποσοτικός προσδιορισμός αυτών των ενώσεων στα τρόφιμα αποτελεί σημαντικό άξονα της ασφάλειας των τροφίμων. Στην παρούσα εργασία παρουσιάζουμε την ανάπτυξη, επικύρωση και την εφαρμογή μιας νέας μεθόδου για τον προσδιορισμό της ισταμίνης και της πρόδρομης ένωσης της, ιστιδίνης, σε δείγματα τροφίμων. Ο διαχωρισμός των ενώσεων πραγματοποιήθηκε γρήγορα μέσω μιας στήλης κατιοντοανταλλαγής, χρησιμοποιώντας 7 mmol L⁻¹ νιτρικό οξύ ως κινητή φάση. Οι προσδιοριζόμενες ενώσεις εκλουόμενες από την στήλη αντιδρούν με το αντιδραστήριο παραγωγοποίησης, ο-φθαλαδιαλδεΐδη, με έναν εκλεκτικό μηχανισμό απουσία πυρηνόφιλων αντιδραστηρίων, σχηματίζοντας φθορίζοντα παράγωγα (360/440 nm). Η ανάπτυξη της μεθόδου περιλάμβανε την βελτιστοποίηση τόσο των χρωματογραφικών συνθηκών, όσο και των συνθηκών της εν-ροή παραγωγοποίησης. Η μέθοδος επικυρώθηκε για την εφαρμογή της σε δείγματα τροφίμων. Τα όρια ανίχνευσης υπολογίστηκαν σε 0,16 μmol L⁻¹ για την ιστιδίνη και 0,17 μmol L⁻¹ για την ισταμίνη (περίπου 0,1 mg kg⁻¹). Η αναληψιμότητα της μεθόδου ήταν ικανοποιητική και κυμάνθηκε σε επίπεδα < 5%. Ποικιλία δειγμάτων τροφίμων αναλύθηκαν επιτυχώς, χωρίς επιδράσεις του υποστρώματος, έπειτα από ελάχιστη προκατεργασία. Τα ποσοστά ανάκτησης ήταν ικανοποιητικά και κυμάνθηκαν μεταξύ 91,3 και 117,9%.



Σχήμα 1. Προσδιορισμός ισταμίνης(HIM) και ιστιδίνης (HIS) σε δείγματα τόνου μετά από παραμονή σε θερμοκρασία περιβάλλοντος (0, 6, 24 h).

Αυτόματη μέθοδος προσδιορισμού του μολύβδου σε πολύ μικρές συγκεντρώσεις σε δείγματα μπύρας με την τεχνική έγχυσης σε ροή (FIA) και On-line εκχύλιση στερεάς φάσης με μικροστήλη προσυγκέντρωσης OasisTM-HLB και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης.

Βασιλική-Ευαγγελία Τσαυτάρη, Ανθεμίδης Αριστείδης
Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
e-mail: vtsoftari@chem.auth.gr

Η παρουσία των τοξικών μετάλλων στα τελικά προϊόντα των αλκοολούχων αναψυκτικών και ποτών είναι αποτέλεσμα πιθανής επιμόλυνσης μέσω των διαφόρων σταδίων της παραγωγικής διαδικασίας (εμφιάλωση, αποθήκευση/ γήρανση) των πρώτων υλών καθώς και ενδεχόμενης νοθείας του προϊόντος. Η έκθεση στα τοξικά μέταλλα όπως ο μόλυβδος, είναι σημαντικός κίνδυνος όχι μόνο για την ανθρώπινη υγεία αλλά και για το περιβάλλον. Ο μόλυβδος είναι ένα εξαιρετικά τοξικό στοιχείο με καρκινογόνες και τοξικές ιδιότητες, που συσσωρεύεται στα βιολογικά συστήματα καθώς εισχωρεί στον οργανισμό μέσω του πεπτικού και αναπνευστικού συστήματος και με την επαφή μέσω του δέρματος. Επομένως, καθίσταται αναγκαίος ο αυτόματος, γρήγορος και με ακρίβεια προσδιορισμός του μολύβδου σε χαμηλά επίπεδα συγκέντρωσης και σε πολύπλοκα υποστρώματα δειγμάτων. Ο σκοπός της παρούσας πτυχιακής εργασίας ήταν η ανάπτυξη μιας αυτόματης, ευαίσθητης και απλής μεθόδου για τον απευθείας προσδιορισμό του μολύβδου σε δείγματα μπύρας, με τη φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας. Η προτεινόμενη βασίζεται στον on-line σχηματισμό και συγκράτηση του συμπλόκου Pb(II)-DDPA από το συμπολυμερές προσροφητικό υλικό OasisTM-HLB της στήλης προσυγκέντρωσης. Στη συνέχεια, για την άμεση και ποσοτική παραλαβή του συμπλόκου πραγματοποιείται έκλυση της στήλης με κατάλληλη ποσότητα μεθανόλης και το έκλουσμα μεταφέρεται στη FAAS για μέτρηση της απορρόφησης. Όλες οι παράμετροι του συστήματος μελετήθηκαν διεξοδικά και η μέθοδος αξιολογήθηκε για τον προσδιορισμό του μολύβδου σε δείγματα μπύρας, αλκοολούχων και μη. Η προτεινόμενη μέθοδος παρουσίασε αξιολογικά και σημαντικά αποτελέσματα καταδεικνύοντας τη δυνατότητα εφαρμογής της σε παρόμοια δείγματα.

Ανάπτυξη αυτόματου συστήματος εκχύλισης προσρόφησης για τον προσδιορισμό του παλλαδίου σε καταλύτες αυτοκινήτων που βασίζεται σε on-line στήλη προσυγκέντρωσης πληρωμένη με ξύσματα-PTFE και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας

Αντωνία Τζιλή, Αριστείδης Ανθεμίδης

Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο, Θεσσαλονίκη 54124, Ελλάδα

e-mail: antotzil@chem.auth.gr, anthemid@chem.auth.gr

Τα τελευταία χρόνια η παρουσία του παλλαδίου στο περιβάλλον γίνεται όλο εντονότερη, λόγω της ευρείας εφαρμογής του. Η παρουσία του στο περιβάλλον οφείλεται κατά μεγάλο μέρος στην απελευθέρωσή του από τα συστήματα εξάτμισης των αυτοκινήτων. Επιπλέον, το χλωριούχο παλλάδιο θεωρείται ισχυρό αλλεργιογόνο. Επομένως, η παρακολούθηση των συγκεντρώσεων του παλλαδίου στο περιβάλλον αλλά και σε βιολογικά δείγματα είναι αναγκαία για την αξιολόγηση της επίδρασής του στους ανθρώπους και τους ζώντες οργανισμούς. Εξαιτίας των πολύ μικρών συγκεντρώσεων του παλλαδίου στα διάφορα δείγματα, απαιτούνται αναλυτικές τεχνικές με υψηλή εκλεκτικότητα και χαμηλά όρια ανίχνευσης. Η σύζευξη της έγχυσης σε ροή (FIA) με on-line στήλες προσυγκέντρωσης σε συνδυασμό με την ατομική φασματομετρία έχει αποδειχτεί ιδιαίτερα αποτελεσματική. Στην παρούσα μελέτη αναπτύχθηκε και βελτιστοποιήθηκε μια πρωτότυπη αυτόματη μέθοδος εκχύλισης στερεά φάσης με στήλη προσυγκέντρωσης και φασματομετρίας ατομικής απορρόφησης με φλόγα (FAAS) για τον προσδιορισμό παλλαδίου σε καταλύτες και περιβαλλοντικά δείγματα. Η στήλη προσυγκέντρωσης πληρώθηκε με ξύσματα-PTFE και χρησιμοποιήθηκε πρώτη φορά για την προσυγκέντρωση του παλλαδίου. Ο προσδιορισμός του Pd(II) επιτυγχάνεται με on-line σχηματισμό του συμπλόκου Pd-DDPA και συγκράτησή του στο προσροφητικό υλικό της στήλης, ακολουθούμενη από έκλουσή του με MIBK και μεταφορά του στο νεφοποιητή της FAAS για μέτρηση της απορρόφησης. Για χρόνο προσυγκέντρωσης 60 s η συχνότητα αναλύσεων ήταν 40 h⁻¹ και ο παράγοντας αύξησης σήματος 114 με όριο ανίχνευσης 0,9 μg L⁻¹. Η προτεινόμενη μέθοδος αξιολογήθηκε για τον προσδιορισμό του παλλαδίου σε δείγματα καταλυτών αυτοκινήτων και υδρογόνωσης καθώς επίσης και σε περιβαλλοντικά δείγματα.

Ανάπτυξη αυτόματης on-line μεθόδου εκχύλισης βασισμένη σε επικαλυμμένες ίνες υάλου και φασματομετρία ατομικής απορρόφησης φλόγας για τον προσδιορισμό τοξικών μετάλλων

Ελένη Λαζαρίδου^{1*}, Abuzar Kabir², Kenneth G. Furton², Αριστείδης Ανθεμίδης¹

¹Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Ελλάδα.

²International Forensic Research Institute, Department of Chemistry and Biochemistry, Florida International University, Miami, FL 33131, USA.

*e-mail: lazaridou@chem.auth.gr

Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε ένα καινοτόμο σύστημα εκχύλισης προσρόφησης βασισμένο στην τεχνική έγχυσης σε ροή σε συνδυασμό με τη φασματομετρία ατομικής απορρόφησης με ατομοποιητή φλόγα για τον αυτόματο προσδιορισμό ιχνοστοιχείων μολύβδου και χρωμίου σε περιβαλλοντικά δείγματα. Το προσροφητικό υλικό για την πλήρωση της μικρο-στήλης προσυγκέντρωσης, παρασκευάστηκε για πρώτη φορά από ίνες υάλου επικαλυμμένες με το sol-gel υλικό πολυ-διφαινυλοσιλοξάνιο (PDPS). Η συγκράτηση των μετάλλων στη στήλη πραγματοποιήθηκε με on-line συμπλοκοποίηση αυτών με πυρρολίδινο διθειοκαρβαμιδικό αμμώνιο (APDC) ενώ για την έκλυση και μεταφορά των προσδιοριζόμενων συστατικών στον ατομοποιητή, χρησιμοποιήθηκε η μέθυλο-ισοβουτύλο-κετόνη (MIBK). Μελετήθηκε διεξοδικά η βελτιστοποίηση των χημικών και των γεωμετρικών παραμέτρων του συστήματος για την επίτευξη μεγαλύτερης ευαισθησίας και απόδοσης της εκχύλισης της προτεινόμενης μεθόδου. Για χρόνο προσυγκέντρωσης 120 s, ο παράγοντας εμπλουτισμού ήταν 215 και 70, το όριο ανίχνευσης 1,1 και 1,2 $\mu\text{g L}^{-1}$ και η σχετική τυπική απόκλιση (RSD) ήταν 3,0% (στα 20,0 $\mu\text{g L}^{-1}$) και 3,2% (στα 20,0 $\mu\text{g L}^{-1}$), για τον προσδιορισμό μολύβδου και χρωμίου, αντίστοιχα.

Μικροεκχύλιση πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων από δείγματα νερού με κάψουλα και προσδιορισμός τους με αέρια χρωματογραφία-φασματομετρία μάζας

N. Μανούση¹, A. Kabir², K. G. Furton², E. E. Rosenberg³, Γ. Α. Ζαχαριάδης¹

¹Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, Ελλάδα, nmanousi@chem.auth.gr,
zacharia@chem.auth.gr,

²Διεθνές Ερευνητικό Ινστιτούτο Εγκληματολογίας, Εργαστήριο Χημικής και Περιβαλλοντικής, Τμήμα Χημείας και Βιοχημείας, Διεθνές Πανεπιστήμιο της Φλόριντα, Μαϊάμι, Φλόριντα, ΗΠΑ, akabir@fiu.edu

³Ινστιτούτο Χημικής Τεχνολογίας & Ανάλυσης, Πολυτεχνείο της Βιέννης, Αυστρία,
egon.rosenberg@tuwien.ac.at

Η μικροεκχύλιση με κάψουλα (capsule phase microextraction, CPME) είναι μια φιλική προς το περιβάλλον τεχνική προκατεργασίας δείγματος που ενσωματώνει το μηχανισμό διήθησης, ανάδευσης και εκχύλισης σε μία κάψουλα. Σε αυτή τη μελέτη, χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά η τεχνική CPME για την εκχύλιση τεσσάρων πολυκυκλικών αρωματικών υδρογονανθράκων (ναφθαλένιο, φλουορένιο, φαινανθρένιο και πυρένιο) από δείγματα νερού πριν από τον προσδιορισμό τους με αέρια χρωματογραφία-φασματομετρία μάζας (GC-MS). Για το σκοπό αυτό αξιολογήθηκαν διάφορα υβριδικά προσροφητικά τύπου sol-gel και η μέγιστη απόδοση εκχύλισης επιτεύχθηκε με το προσροφητικό υλικό πολυ(καπρολακτόνη)-πολυ(διμεθυλοσιλοξάνης)-πολυ (καπρολακτόνη). Κατόπιν πραγματοποιήθηκε βελτιστοποίηση των κυρίων παραμέτρων που επηρεάζουν την επίδοση της μεθόδου CPME. Υπό τις βέλτιστες συνθήκες, τα όρια ανίχνευσης για τις προσδιοριζόμενες ενώσεις κυμαίνονταν μεταξύ 0.03-0.07 ng mL⁻¹. Η σχετική τυπική απόκλιση για την επαναληψιμότητα εντός της ημέρας και μεταξύ ημερών ήταν χαμηλότερη από 7,7% και 8,5%, αντίστοιχα. Επιπλέον, η μέθοδος CPME παρουσίασε καλή γραμμικότητα καθώς και δυνατότητα επαναχρησιμοποίησης των μέσων μικροεκχύλισης. Η μέθοδος εφαρμόστηκε επιτυχώς στην ανάλυση δειγμάτων νερού δικτύου ύδρευσης, μεταλλικού νερού και νερού λίμνης. Οι σχετικές ανακτήσεις της μεθόδου κυμάνθηκαν μεταξύ 94,3 και 109,8%. Συμπερασματικά, η μέθοδος CPME είναι μία πράσινη μέθοδος που θα μπορούσε να απλοποιήσει αποτελεσματικά τη συνολική διαδικασία προκατεργασία δείγματος, καθώς δεν απαιτεί διήθηση του δείγματος πριν από την εκχύλιση και εξάτμιση του διαλύτη και την ανασύσταση του δείγματος μετά την εκχύλιση.



Η ερευνητική εργασία υποστηρίχθηκε από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) στο πλαίσιο της Δράσης «Υποτροφίες ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. Υπομηφίων Διδασκόντων» (Αριθμός Υποτροφίας: 138)

Εφαρμογή της εκχύλισης με υφασμάτινο μέσο (FPSE) για την ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού έξι δισφαινολών και της διαιθυλοστιλβεστρόλης σε δείγματα ούρων με υγρή χρωματογραφία υψηλής πίεσης (HPLC) και ανιχνευτή παράταξης φωτοδιόδων (PDA)

B. Αλαμπάνος^{1*}, A. Kabir.², K. Furton², B. Σαμανίδου¹

¹Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, Ελλάδα

²Διεθνές Ινστιτούτο Ιατροδικαστικής Τοξικολογικής Έρευνας, Τμήμα Χημείας και Βιοχημείας, Διεθνές Πανεπιστήμιο της Φλόριντα, Μαϊάμι, Ηνωμένες Πολιτείες Αμερικής

*e-mail: vdalampa@chem.auth.gr

Η εκχύλιση με υφασμάτινο μέσο (Fabric phase sorptive extraction), αποτελεί μια σύγχρονη τεχνική προκατεργασίας δείγματος, η οποία παρουσιάστηκε για πρώτη φορά από τους Kabir και Furton το 2014 και εναρμονίζεται με τις αρχές της Πράσινης Αναλυτικής Χημείας. Η τεχνική αυτή στηρίζεται στην προσρόφηση σε ειδικό μέσο (μεμβράνη), αποτελούμενο από υφασμάτινο υπόστρωμα κυτταρίνης ή πολυεστέρα επικαλυμμένο με πολυμερή προσροφητικά υλικά. Τα υλικά αυτά έχουν προσδεθεί με ομοιοπολικούς δεσμούς στο υφασμάτινο υπόστρωμα, κάνοντας χρήση της καινοτόμου τεχνολογίας επίστρωσης με ενδιάμεση δημιουργία ειδικού κolloειδούς διαλύματος (sol-gel). Η σύνδεση με αυτό τον τρόπο προσδίδει στο τελικό μέσο εκχύλισης ειδικές προηγμένες ιδιότητες, πορώδη δομή, διαπερατότητα, ευκαμψία και σταθερότητα.

Στην παρούσα εργασία, η εκχύλιση με υφασμάτινο μέσο χρησιμοποιήθηκε για την ανάπτυξη και επικύρωση μιας νέας μεθόδου προσδιορισμού επτά ενδοκρινικών διαταρακτών σε δείγματα ούρων με υγρή χρωματογραφία υψηλής πίεσης (HPLC) και ανιχνευτή παράταξης φωτοδιόδων (PDA). Πιο συγκεκριμένα, οι μελετούμενες ενώσεις ήταν έξι δισφαινόλες, συμπεριλαμβανομένων της δισφαινόλης A, της δισφαινόλης S, της δισφαινόλης F, της δισφαινόλης E, της δισφαινόλης B, της δισφαινόλης C, και η διαιθυλοστιλβεστρόλη (DES).

Μεταξύ δεκαοκτώ διαφορετικών μεμβρανών FPSE που δοκιμάστηκαν, η μεμβράνη υφασμάτινου υποστρώματος κυτταρίνης επικαλυμμένη με πολυμερή πολυ-αιθυλενογλυκόλη (sol-gel PEG) αποδείχθηκε πως εξασφαλίζει την πιο αποτελεσματική εκχύλιση. Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε βελτιστοποίηση της εκχύλισης, ως προς τους παράγοντες που θεωρείται πως ασκούν κρίσιμη επίδραση στην αποτελεσματικότητά της. Οι παράγοντες αυτοί είναι το μέγεθος της μεμβράνης FPSE, το είδος τους μίγματος διαλυτών έκλουσης, ο όγκος του δείγματος, ο χρόνος της εκχύλισης, ο χρόνος της έκλουσης, το είδος της ανάδευσης, η ιοντική ισχύς και το pH του δείγματος.

Ο χρωματογραφικός διαχωρισμός επιτεύχθηκε σε στήλη Spherisorb C₁₈, με πρόγραμμα βαθμωτής έκλουσης, ενώ η κινητή φάση αποτελούνταν από υδατικό διάλυμα οξικού αμμωνίου 0,05M και ακετονιτρίλιο. Ο συνολικός χρόνος ανάλυσης ήταν 17,4 λεπτά. Η μέθοδος επικυρώθηκε ως προς τη γραμμικότητα, την ευαισθησία, την επιλεκτικότητα, την ακρίβεια, την πιστότητα, την ανθεκτικότητα και τη σταθερότητα. Τα όρια ανίχνευσης και ποσοτικού προσδιορισμού κυμάνθηκαν από 0,26-0,62 μg/L και 0,8-1,9 μg/L, αντίστοιχα. Οι σχετικές ανακτήσεις υπολογίστηκαν μεταξύ 90,6 και 108,8%, ενώ οι τιμές % RSD ήταν μικρότερες από 10%. Η καταλληλότητα και η αποτελεσματικότητα της προτεινόμενης μεθόδου επιβεβαιώθηκε από την επιτυχή εφαρμογή της στη βιοανάλυση πραγματικών δειγμάτων ούρων.

Συγχορήγηση Νανοσωματιδίων-Αντιβιοτικών για εξειδικευμένες αντιμικροβιακές ιδιότητες

¹Κλεονίκη Γιαννούση, ²Ιωάννα Ελευθεριάδου, ¹Αικατερίνη Δενδρινού-Σαμαρά
¹Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
54124

²Εργαστήριο Γενικής Μικροβιολογίας, Τομέας Γενετικής Ανάπτυξης και Μοριακής Βιολογίας, Τμήμα Βιολογίας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Α.Π.Θ., Θεσσαλονίκη
email: klegia@chem.auth.gr

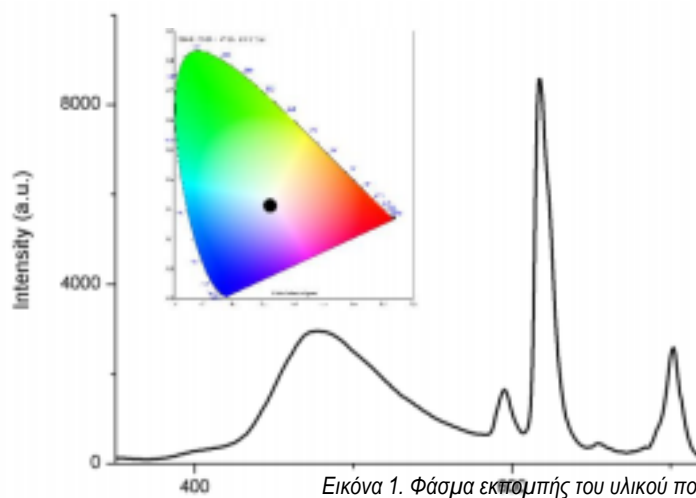
Η ολοένα και αυξανόμενη χορήγηση αντιβιοτικών έχει οδηγήσει στο παγκόσμιο πρόβλημα της μικροβιακής αντοχής. Η νανοτεχνολογία αποτελεί χρήσιμο εργαλείο στην προσπάθεια εύρεσης νέων θεραπευτικών προσεγγίσεων. Πληθώρα ανόργανων νανοσωματιδίων έχουν δοκιμαστεί ως αντιμικροβιακοί παράγοντες. Ωστόσο, το πέρασμα στην εφαρμογή σε κάποιες περιπτώσεις περιορίζεται από τις υψηλές αποτελεσματικές δόσεις, οι οποίες δημιουργούν προβλήματα κυτταροτοξικότητας και διαλυτότητας. Στην παρούσα μελέτη πραγματοποιήθηκε η σύνθεση επικαλυμμένων οργανικών/ανόργανων νανοσωματιδίων (NPs) οξειδίου του χαλκού (CuO), οξειδίου του ψευδαργύρου (ZnO) και διμεταλλικών νανοσωματιδίων CuZn. Η σύνθεση των NPs έγινε παρουσία πολυολών διαφόρων μοριακών βαρών, ενώ ο χαρακτηρισμός τους πραγματοποιήθηκε με μεθόδους υγρής και στερεάς κατάστασης. Τα επικαλυμμένα με πολυόλες νανοσωματίδια ελέγχθηκαν ως προς την κυτταροτοξικότητα και την αντιβακτηριακή τους δράση. Ακολούθησε *in vitro* μελέτη της δράσης τους στις αντλίες εκροής, μέσω των οποίων τα βακτήρια απομακρύνουν μεταξύ άλλων τα αντιβιοτικά, γενώντας πολυανθεκτικά βακτηριακά στελέχη. Η συγχορήγηση των νανοσωματιδίων σε σχετικά χαμηλές δόσεις και των αντιβιοτικών μεροπενέμη και σιπροφλαξασίνη στην πολυανθεκτική *Pseudomonas aeruginosa* οδήγησε σε αναστολή των αντλιών εκροής της και καταγράφηκε συνέργεια. Συνεπώς, τα βιοσυμβατά επικαλυμμένα νανοσωματίδια προτείνονται ως ενισχυτικά της δράσης των υπαρχόντων αντιβιοτικών, υπερπηδώντας την ανάγκη εύρεσης νέων κοστοβόρων οργανικών ενώσεων με αντιμικροβιακή δράση.

«Η υλοποίηση της μεταδιδακτορικής έρευνας/εργασίας συγχρηματοδοτήθηκε από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «ΕΝΙΣΧΥΣΗ ΜΕΤΑΔΙΔΑΚΤΟΡΩΝ ΕΡΕΥΝΗΤΩΝ/ΕΡΕΥΝΗΤΡΙΩΝ - Β κύκλος» (MIS 5033021) που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).

Φωταυγή μεταλλοργανικά πλέγματα λανθανίδων ως εκπομποί λευκού φωτός

Ψάλτη Αθανασία^{1*}, Χατζηδημητρίου Αντώνιος¹, Λαζαρίδης Θεόδωρος¹
¹Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Ελλάδα,
 e-mail: *aepsalti@chem.auth.gr, tlazarides@chem.auth.gr,

Τα τελευταία χρόνια, μέρος του ενδιαφέροντος της επιστημονικής κοινότητας έχει επικεντρωθεί στη σύνθεση μεταλλοργανικών πλεγμάτων (Metal Organic Frameworks MOF). Τα μεταλλικά οργανικά πλέγματα αποτελούν μια τάξη πορωδών υβριδικών υλικών που δομούνται από μεταλλικά ιόντα ή cluster και από οργανικά ligand. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν τα φωταυγή μεταλλοργανικά πλέγματα των λανθανιδών λόγω της ικανότητας τους να εκπέμπουν φως σε διάφορα μήκη κύματος και λόγω της μεταβολής της φωταύγειας τους παρουσία ιόντων ή/και μορίων.^{2, 3} Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται η σύνθεση, ο χαρακτηρισμός και η φασματοσκοπική μελέτη φωταυγών μεταλλοργανικών πλεγμάτων λανθανιδών που εκπέμπουν στην περιοχή του ορατού και συγκεκριμένα στην περιοχή του λευκού φως. Αυτό επιτυγχάνεται με την πρόσμειξη στα MOF με τρισθενή ιόντα Eu³⁺ αλλά και με αμινο-παράγωγα των δομικών ligand που χρησιμοποιούνται κατά τη σύνθεση. Συγκεκριμένα, το οργανικό ligand που επιλέχθηκε στην παρούσα μελέτη είναι το naphthalene-2,6-dicarboxylic acid (H₂NDC) και ως μεταλλικά κέντρα, το La³⁺ και το Gd³⁺. Τα υλικά που συντέθηκαν παρουσίασαν εκπομπή με χαρακτήρα excimer (Εικόνα 1) ενώ το χρώμα της εκπομπής τους ρυθμίστηκε με προσεκτική εισαγωγή διαφορετικών ποσοστών πρόσμειξης ιόντων Eu³⁺ και ligand 4- aminonaphthalene-2,6-dicarboxylic acid (H₂ANDC) στο πλέγμα των MOF.



Εικόνα 1. Φάσμα εκπομπής του υλικού που εκπέμπει στην περιοχή του λευκού φωτός. Στο ένθετο παρουσιάζεται το διάγραμμα συντεταγμένων του υλικού.

1. M. D. Allendorf, C. A. Bauer, R. K. Bhakta and R. J. T. Houk, *Chemical Society Reviews* **38** (5), 1330-1352 (2009).
2. J.-C. Bünzli and S. Eliseeva, (2010), Vol. 7, pp. 1-45.
3. W. P. Lustig and J. Li, *Coordination Chemistry Reviews* **373**, 116-147 (2018).

.Ετεροληπτικά σύμπλοκα του αργύρου(I) με διφωσφίνες και ετεροκυκλικά θειοαμιδία: σύνθεση, κρυσταλλικές δομές, αντιβακτηριακή και αντικαρκινική δραστηριότητα

Δέσποινα Βαρνά, Ρηγίνη Παπή, Ελένη Παπαχρήστου, Αντώνιος Χατζηδημητρίου,
Γεώργιος Ψωμάς, Θεοδώρα Χολή-Παπαδοπούλου, Παναγιώτης Αγγαρίδης
Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
email: varndesp@chem.auth.gr

Περίληψη

Η επιστημονική έρευνα για την ανακάλυψη νέων ενώσεων συναρμογής με στόχο την αντιμετώπιση διαφόρων ασθενειών, όπως ο καρκίνος, αποτελεί ένα τομέα έντονης δραστηριότητας. Εκτός από τα σύμπλοκα της ομάδας του Pt, ιδιαίτερο ενδιαφέρον εμφανίζουν οι ενώσεις συναρμογής των μετάλλων της Ομάδας 11 και συγκεκριμένα οι ενώσεις του Ag(I), λόγω της χαμηλής τοξικότητας του μετάλλου αλλά και της ικανότητάς του να αναστέλλει τη μεταβολική δράση πολλών ενζύμων.[1] Τα τελευταία χρόνια έχει διαπιστωθεί η αντιμικροβιακή δράση διαφόρων συμπλόκων ενώσεων του Ag(I),[2] όπως επίσης και η *in vitro* κυτταροτοξική τους δράση έναντι πολλών καρκινικών κυτταρικών σειρών, που πολλές φορές είναι μεγαλύτερη από αυτή την *cisplatin* και με καλύτερη εκλεκτικότητα.[3] Στα πλαίσια αυτό, στην παρούσα μελέτη παρουσιάζεται μια σειρά ενώσεων συναρμογής του Ag(I) που φέρουν ως ligand διάφορους συνδυασμούς διφωσφινών και ενός ετεροκυκλικού θειοαμιδίου (στην ουδέτερη ή ανιονική του μορφή), τα οποία διαφοροποιούνται μεταξύ τους ως προς το συνολικό φορτίο, την πυρηνικότητα, τον αριθμό συναρμογής του μεταλλικού κέντρου, την παρουσία ή απουσία συναρμοσμένου αλογονιδίου ή αντισταθμιστικού ιόντος. Η χρήση ligand με δυνατότητα χηλικής συναρμογής και ο μαλακός χαρακτήρας των ατόμων δοτών τους σε συνδυασμό με το επίσης μαλακού χαρακτήρα οξέος μεταλλικού κέντρου Ag(I) αναμένονται να συμβάλλουν σημαντικά στην κινητική σταθεροποίηση των συμπλόκων σε βιολογικά περιβάλλοντα. Η βιοδραστική ικανότητα των νέων αυτών ενώσεων μελετήθηκε με *in vitro* μελέτες της αντιβακτηριακής τους δράσης έναντι διαφόρων Gram+ και Gram- βακτηριακών στελεχών, όπως επίσης και με *in vitro* μελέτες της κυτταροτοξικής τους δράσης έναντι φυσιολογικών κυττάρων ινοβλαστών και καρκινικών κυττάρων του αδένου του μαστού (MCF-7) και του τραχήλου (Hela). Επιπρόσθετα, προσδιορίστηκε η αντιοξειδωτική δράση των ενώσεων αυτών με τη δέσμευση ελευθέρων ριζών H₂O₂, ABTS και DPPH. Βάσει των αποτελεσμάτων αυτών, έγιναν προσπάθειες προσδιορισμού πιθανών σχέσεων δομής-βιολογικής δραστηριότητας. Τέλος, προκειμένου να συλλεχθούν στοιχεία για τον πιθανό τρόπο δράσης των ενώσεων αυτών πραγματοποιήθηκαν μελέτες της αλληλεπίδρασής τους σε διάλυμα με CT-DNA όπως και με αλβουμίνες HSA και BSA.

[1]. D. Russel, F. R. C. Path, W. B. Hugo, Antimicrobial activity and action of silver. Prog. Med. Chem. 1994

[2]. (α) K. Nomiya, K. Tsuda, N. C. Kasuga, Synthesis and X-ray characterization of helical polymer complexes. [Ag(1,2,3-L)(PPh₃)₂]_n and [Ag(1,2,4-L)(PPh₃)₂]_n (HL = triazole) and their antimicrobial activities, J. Chem. Soc., Dalton Trans. 1998, 1653. (β) M. I. Azócar, G. Gómez, C. Velásquez, R. Abarca, M.J. Kogan, M. Páez, Antibacterial, kinetics and bacteriolytic properties of silver(I) pyridinedicarboxylate compounds, Mater. Sci. Eng. C 2014, 37, 356

[3]. U. Ndagi, N. Mhlongo, M. E. Soliman, Metal complexes in cancer therapy-an update from drug design perspective, Drug Design, Development and Therapy 2017, 11, 599

Σύνθεση, χαρακτηρισμός και βιολογική δράση συμπλόκων ενώσεων του χαλκού(II) με μη-στεροειδή αντιφλεγμονώδη φάρμακα

Γεώργιος Μαλής, Αντώνιος Χατζηδημητρίου, Γεώργιος Ψωμάς
Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

email: georgmalis@chem.auth.gr hatzidim@chem.auth.gr gepsomas@chem.auth.gr

Ο χαλκός παρουσιάζει μία εκτενή βιολογική δράση στον ανθρώπινο οργανισμό καθώς είναι απαραίτητο ιχνοστοιχείο και συνδέεται με τις σερουλοπλασμίνες, αλβουμίνες και διάφορες άλλες πρωτεΐνες. Υπάρχει μία πληθώρα παραδειγμάτων θεραπευτικών ενώσεων του χαλκού καθώς χρησιμοποιείται εκτεταμένα σε σύμπλοκα με διάφορα φάρμακα (π.χ. CuAlgesic, Cupralene/Permalon κ.ά.) [1]. Τα μη-στεροειδή αντιφλεγμονώδη φάρμακα (ΜΣΑΦ) είναι από τα πλέον χρησιμοποιούμενα φάρμακα σε ολόκληρο τον κόσμο λόγω των αντιπυρετικών, αναλγητικών και αντιφλεγμονωδών ιδιοτήτων τους. Ο κύριος

μηχανισμός δράσης των ΜΣΑΦ είναι η αναστολή της δράσης της κυκλο-οξυγενάσης [2]. Παράλληλα, ΜΣΑΦ όπως η ιβουπροφαίνη, φαίνεται ότι μπορούν να βοηθήσουν στην τρέχουσα πανδημία του COVID-19, συμβάλλοντας στην αντιμετώπιση των συμπτωμάτων καθώς και στη βελτίωση της κλινικής εικόνας των ασθενών, αυξάνοντας τον αριθμό των λευκοκυττάρων τους [3].

Σκοπός της παρούσας εργασίας, είναι σύνθεση, ο χαρακτηρισμός της δομής, και η μελέτη της βιολογικής δράσης συμπλόκων ενώσεων του χαλκού(II) με τα ΜΣΑΦ ιβουπροφαίνη, φαινοπροφαίνη, λοξοπροφαίνη, και κλονιξίνη, παρουσία των δοτών ατόμων N: ιμιδαζόλιο, πυριδίνη και 2,9-διμεθυλο-1,10-φαινανθρολίνη. Ο χαρακτηρισμός των συμπλόκων πραγματοποιήθηκε με μετρήσεις μοριακής αγωγιμότητας, φασματοσκοπικές τεχνικές (IR, UV-vis, ¹H NMR), ενώ η περίθλαση ακτίνων-Χ χρησιμοποιήθηκε για την επίλυση των κρυσταλλικών δομών των συμπλόκων. Η βιολογική δράση των ενώσεων μελετήθηκε μέσω της μελέτης αλληλεπίδρασης των ενώσεων με το DNA (calf-thymus DNA) με φασματοσκοπία UV-vis, κυκλική βολταμμετρία και ιξωδομετρία. Επιπλέον μελετήθηκε η ικανότητα των ενώσεων να αντικαθιστούν το αιθίδιο βρωμίδιο καθώς και η αλληλεπίδραση των ενώσεων με την ανθρώπινη (HSA) και βοοειδή αλβουμίνη ορού αίματος (BSA).

Η εργασία αυτή πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο της μεταπτυχιακής διατριβής του κ. Γεωργίου Μαλή σύμφωνα με το πρόγραμμα σπουδών του Δι-ιδρυματικού Μεταπτυχιακού Προγράμματος Ανόργανης Βιολογικής Χημείας που λειτουργεί στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων με τη συνεργασία των Τμημάτων Χημείας των Πανεπιστημίων Ιωαννίνων, Αθήνας, Θεσσαλονίκης, Πάτρας, Κρήτης και του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Κύπρου.

Βιβλιογραφία

- [1] Γ. Κεσίσογλου, .Δ, Ψωμάς, *Βιοανόργανη Χημεία*, Εκδόσεις ΖΗΤΗ, **2011**.
- [2] C. N. Banti, S. K. Hadjikakou, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2016**, 2016, 3048-3071.
- [3] M. T. Kelleni, *Biomed. Pharmacother.* **2021**, 133, 110982

De novo σύνθεση γενετικών αλληλουχιών για recombinamers

Κεραμιδάς Π.¹, Μάντσου Α.¹, Λάμπρου Π.¹, Χολή-Παπαδοπούλου Θ.¹

¹ Εργαστήριο Βιοχημείας, Τομέας Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

e-mail: pankerdim98@outlook.com

Περίληψη

Η εύρεση κατάλληλων υλικών για την ελεγχόμενη αντικατάσταση και θεραπεία δυσλειτουργικών οργάνων και ιστών αποτελεί ένα από τα κύρια αντικείμενα έρευνας των βιοϊατρικών επιστημών. Γι' αυτό το λόγο, έχουν αναπτυχθεί τα λεγόμενα βιοϋλικά, τα οποία μιμούνται πολλές από τις λειτουργίες και τα χαρακτηριστικά που εμφανίζουν τα βιολογικά συστήματα, όπως τις δυναμικές συνθήκες λειτουργίας, την εκλεκτικότητα και την ικανότητα σηματοδότησης. Έτσι, στα πλαίσια της παρούσας εργασίας πραγματοποιήθηκε, με γενετική μηχανική, ο σχεδιασμός και η παραγωγή τεσσάρων ανασυνδυασμένων γονιδίων, τα οποία εκφραζόμενα στις αντίστοιχες πρωτεΐνες, δυνητικά θα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως βιο-ικριώματα στα πλαίσια της μηχανικής των ιστών. Ο σχεδιασμός και η παραγωγή των ενθεμάτων έγινε με την τεχνική της αλυσιδωτής αντίδρασης πολυμεράσης (PCR), ενώ η σύνθεση των τελικών γονιδίων επιτεύχθηκε μέσω της σύνδεσης των ενθεμάτων με ανακατασκευή του κατάλληλου πλασμιδιακού φορέα.

Η ερευνητική εργασία υποστηρίχθηκε από το επιχειρησιακό πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα, Καινοτομία», μέσω της Δράσης «Ερευνώ, Δημιουργώ, Καινοτομώ» (Αριθμός: Τ1ΕΔΚ-04567).

Καθαρισμός βιοϊκριωμάτων με μοτίβα προσκόλλησης σε κύτταρα για εφαρμογή στην αναγέννηση οστού και χόνδρου

Μάντσου Α., Κεραμιδάς Π., Λάμπρου Π., Χολή-Παπαδοπούλου Θ.
Εργαστήριο Βιοχημείας, Τομέας Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο
Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: mantsouav@chem.auth.gr

Οι εκφυλιστικές παθήσεις του οστού και του χόνδρου, όπως η οστεοαρθρίτιδα και η οστεοπόρωση, καθώς και οι τραυματισμοί των αρθρώσεων εμφανίζονται σε σημαντικό ποσοστό των ενηλίκων παγκοσμίως και επηρεάζουν την ποιότητα της ζωής και της εργασίας. Υπάρχει αυξανόμενη ανάγκη για τη δημιουργία ασφαλών και βιοσυμβατών υλικών που θα επάγουν την αναγέννηση του εκφυλισμένου ιστού. Στα πλαίσια αυτής της εργασίας, κατασκευάστηκαν πρωτεΐνες *de novo*, οι οποίες αποτελούνται από επαναλαμβανόμενα δομικά μοτίβα (*recombinamers*). Τα δομικά μοτίβα προέρχονται από φυσικές πρωτεΐνες και χαρακτηρίζονται από ελαστικότητα, αντοχή σε μηχανικό και θερμικό στρες και δεν προκαλούν απόκριση του ανοσολογικού συστήματος. Επιπλέον, περιέχουν μοτίβα πρωτεϊνών του εξωκυττάρου στρώματος των ανθρώπινων συνδετικών ιστών (ινωδονεκτίνη, λαμνίνη) οι οποίες προσκολλώνται στην επιφάνεια των κυττάρων καθώς και μοτίβα αυξητικών παραγόντων που επάγουν τη διαφοροποίηση μεσεγχυματικών κυττάρων σε οστεοβλάστες ή σε χονδροβλάστες. Οι γενετικές αλληλουχίες των *recombinamers* συντέθηκαν *de novo* και ενσωματώθηκαν σε ειδικό πλασμιδιακό φορέα έκφρασης. Στη συνέχεια, υπερεκφράστηκαν σε μεγάλης κλίμακας καλλιέργειες κυττάρων *Escherichia coli* BL21 και οι πρωτεΐνες καθαρίστηκαν με χρωματογραφία αγκιστείας ιόντων νικελίου, έναντι μίας ουράς 6 ιστιδινών που είχε ενσωματωθεί γενετικά στο καρβοξυτελικό άκρο τους. Τα καθαρισμένα πολυπεπτίδια θα διασυνδεθούν με σταυροδεσμούς λυσίνης για να σχηματίσουν βιοϊκρίσματα, πάνω στα οποία θα επαχθεί η διαφοροποίηση ανθρώπινων μεσεγχυματικών σε οστεοκύτταρα και χονδροκύτταρα.

Η ερευνητική εργασία υποστηρίχθηκε από:

- Το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) στο πλαίσιο της Δράσης «Υποτροφίες ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. Υποψηφίων Διδασκτόρων» (Αριθμός Υποτροφίας: 371)
- Το επιχειρησιακό πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα, Καινοτομία», μέσω της Δράσης «Ερευνώ, Δημιουργώ, Καινοτομώ» (Αριθμός: Τ1ΕΔΚ-04567).

Συστηματική ταυτοποίηση των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών στο *Thermus thermophilus* HB8

Παπή Ρ., Γιουρίεβα Β., Βασιλικός Λ., Ζήση Μ., Κεχαγιόγλου Π., Ρεσβάνη Π., Τσαχίδου Μ. και Κυριακίδης Δ.

Εργαστήριο Βιοχημείας, Τομέας Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

e-mail: rigini@chem.auth.gr

Τα περισσότερα βακτήρια δρουν σε ένα συνεχώς μεταβαλλόμενο περιβάλλον, όπου είναι απαραίτητο να αντιλαμβάνονται τις περιβαλλοντικές αλλαγές προκειμένου να επιβιώσουν. Οι κυριότεροι αισθητήριοι μηχανισμοί προσαρμογής και αντίληψης των εξωτερικών σημάτων στα βακτήρια είναι τα συστήματα μετάδοσης σήματος δυο συστατικών. Τα συστήματα αυτά αποτελούνται από κινάσες ιστιδίνης, οι οποίες αντιλαμβάνονται το εξωτερικό ερέθισμα και από τους αντίστοιχους ρυθμιστές απόκρισης για τη μεταγωγή σήματος και την κυτταρική προσαρμογή. Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η ταυτοποίηση των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών στο βιοτεχνολογικά σημαντικό βακτήριο *Thermus thermophilus* HB8. Από τη συγκριτική μελέτη βάσεων δεδομένων, που περιλαμβάνουν γονιδιώματα και οικογένειες πρωτεϊνικών περιοχών, αναγνωρίστηκαν 11 κινάσες ιστιδίνης και 14 ρυθμιστές απόκρισης. Όλα τα γονίδια των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών εντοπίζονται στο χρωμοσωμικό DNA, με εξαίρεση ένα συγγενές ζεύγος κινάσης-ρυθμιστή που βρέθηκε στο pTT27 mega-πλασμίδιο. Περαιτέρω έρευνα σε διάφορες βάσεις δεδομένων οδήγησε στην κατασκευή ενός υπολογιστικά υποθετικού μοντέλου της διασταυρούμενης επικοινωνίας μεταξύ συγγενών, μη-συγγενών και ορφανών συστατικών των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών. Με σκοπό την πειραματική απόδειξη του υπολογιστικού αυτού μοντέλου, η εργασία επικεντρώθηκε στον *in vitro* χαρακτηρισμό των υπολογιστικά αναγνωρισμένων κινασών ιστιδίνης και των ρυθμιστών απόκρισης. Κλωνοποιήθηκε όλη η αλληλουχία κωδικοποίησης των ρυθμιστών απόκρισης καθώς και οι περικομμένες μορφές των κινασών με αφαίρεση του N-τελικού διαμεμβρανικού τμήματος. Οι αντίστοιχες πρωτεΐνες υπερεκφράστηκαν και ακολούθησε καθαρισμός με στήλη αγκιστείας. Δοκιμές *in vitro* φωσφορυλίωσης με ραδιενεργό ³²P-ATP αποκάλυψαν την ύπαρξη 9 ενεργών κινασών. Οι περισσότερες κινάσες φωσφορυλιώνουν συγγενείς ρυθμιστές απόκρισης και σε λιγότερο βαθμό μη-συγγενείς δείχνοντας την ύπαρξη δικτύου διασταυρούμενης επικοινωνίας. Αξίζει να αναφερθεί ότι, ορισμένες κινάσες, κάτω από τις πειραματικές συνθήκες που χρησιμοποιήθηκαν, δεν πραγματοποίησαν φωσφομεταφορά σε συγγενείς ρυθμιστές αλλά μετέφεραν τη φωσφορική ομάδα σε μη-συγγενείς ή ορφανούς ρυθμιστές. Η παρούσα εργασία αποτελεί την πρώτη αναφορά της ύπαρξης δικτύου διασταυρούμενης επικοινωνίας μεταξύ των συστημάτων μετάδοσης σήματος δυο συστατικών σε θερμόφιλο βακτήριο. Περαιτέρω έρευνα θα δώσει περισσότερες πληροφορίες για το εξωτερικό σήμα που ενεργοποιεί τις κινάσες και την αντίστοιχη απόκριση του κυττάρου.

***In vitro* και *in silico* διερεύνηση του μηχανισμού πρόσδεσης ενός συμπλόκου V(IV) – κourκουμίνης στην αλβουμίνη, το DNA και τη DNA γυράση και μελέτη της αιμοσυμβατότητας**

Αυγουλάς Δ.^{1*}, Κασιόπης Γ.¹, Χαλέβας Ε.², Γερομιχαλού Ε.³, Γερομιχαλός Γ.¹, Πανταζάκη Α.¹

¹Εργαστήριο Βιοχημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

²Ινστιτούτο Νανοεπιστήμης και Νανοτεχνολογίας, ΕΚΕΦΕ “Δημόκριτος”, 15310 Αγία Παρασκευή, Αθήνα

³Εργαστήριο Φαρμακολογίας, Ιατρική Σχολή, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Μικράς Ασίας 75, 11527, Αθήνα

*e-mail: dimianvgou@gmail.com

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η γνώση των μηχανισμών αλληλεπίδρασης μεταξύ φαρμάκων και αλβουμίνης είναι πολύ σημαντική στην κατανόηση των φαρμακοκινητικών και φαρμακοδυναμικών ιδιοτήτων. Η απορρόφηση, η διανομή, ο μεταβολισμός και η απέκκριση των φαρμάκων μπορούν να επηρεαστούν σημαντικά ως αποτέλεσμα της πρόσδεσης σε αυτή την πρωτεΐνη. Από την άλλη μεριά, το DNA αποτελεί έναν από τους κύριους στόχους πολλών αντικαρκινικών φαρμάκων και η αλληλεπίδρασή του με ουσίες μπορεί να προξενήσει ζημιά στα καρκινικά κύτταρα οδηγώντας στο θάνατό τους. Ένα καινοτόμο σύμπλοκο V(IV) – κourκουμίνης συντέθηκε και μελετήθηκε η αλληλεπίδρασή του με την αλβουμίνη και το DNA. Η αξιολόγηση της αλληλεπίδρασης του συμπλόκου με την αλβουμίνη ορού βοοειδών (BSA) έγινε με χρήση φασματοσκοπίας εκπομπής φθορισμού, αποδεικνύοντας την ύπαρξη μίας θέσης πρόσδεσης υψηλής αγκιστείας. Επιπλέον, η δοκιμασία αιμοσυμβατότητας που πραγματοποιήθηκε συστήνει ασφαλή εφαρμογή του σε αλληλεπίδραση με το αίμα. Η πρόσδεσή του στο DNA διερευνήθηκε με μεθόδους απορρόφησης, φθορισμού και ιξωδομετρίας. Οι πειραματικές μελέτες έδειξαν ότι το σύμπλοκο προσδένεται στο DNA μέσω της μικρής αύλακας. Τέλος, αξιοποιήθηκαν μοριακές προσομοιώσεις στις κρυσταλλικές δομές της BSA, του CT DNA και της DNA γυράσης με σκοπό τη μελέτη της *in silico* ικανότητας του συμπλόκου να προσδένεται στα μακρομόρια-στόχους, καθώς και την εξήγηση της *in vitro* δράσης.

Πρόταση για τη διδασκαλία της ενότητας «Χημικές αντιδράσεις» μέσα στα πλαίσια του μαθήματος της Χημείας της Α' Λυκείου υπό το πρίσμα της διδακτικής προσέγγισης «μαθητής - μικρός ερευνητής»

Καργόπουλος Α., Γιαννακουδάκης Π.

Εργαστήριο Χημικής Εκπαίδευσης, Εφαρμογής Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνιών στη Χημεία, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: andkargopoulos@gmail.com panjian@chem.auth.gr

Η διδακτική πρόταση αφορά την ενότητα «Χημικές αντιδράσεις», η οποία διδάσκεται μέσα στα πλαίσια του μαθήματος της Χημείας της Α' Λυκείου και στηρίζεται στη διδακτική προσέγγιση «μαθητής-μικρός ερευνητής». Υποστηρίζουμε ότι ο μαθητής έχοντας την απαραίτητη θεωρητική υποδομή, την εργαστηριακή πείρα μπορεί να βρεθεί μπροστά σε ένα άγνωστο πρόβλημα στο εργαστήριο και να σχεδιάσει μία στρατηγική επίλυσής του. Απαιτείται όμως η προετοιμασία του τόσο στη σχολική αίθουσα όσο και στο σχολικό εργαστήριο αξιοποιώντας όλες τις μεθόδους, από την άμεση διδασκαλία έως την καθοδηγούμενη ακόμα και την ελεύθερη ανακάλυψη. Αν λείπει η κατάλληλη προετοιμασία, η εμπειρία έχει δείξει ότι ο μαθητής χάνεται στις διάφορες δραστηριότητες, αδυνατεί να προσεγγίσει τους πραγματικούς νόμους των φυσικών επιστημών και εν τέλει βγάζει τα δικά του υποκειμενικά συμπεράσματα για το τι συμβαίνει στη φύση, χωρίς να ακολουθεί καμία προσπάθεια διόρθωσης των εσφαλμένων απόψεων και αντιλήψεων στις οποίες κατέληξε.

Η πρόταση μας αποτελείται από 10 διδακτικές ώρες. Οι πρώτες πέντε πραγματοποιούνται στη σχολική αίθουσα κατά τη διάρκεια των οποίων ο μαθητής, με βάση το υπάρχον αναλυτικό πρόγραμμα, εμβαθύνει στην έννοια της χημικής αντίδρασης, προσεγγίζει την κινητική και ενεργειακή μελέτη των χημικών αντιδράσεων, μαθαίνει να τις κατηγοριοποιεί. Κατά τη διάρκεια των επόμενων πέντε διδακτικών ωρών, ο μαθητής μέσα στο σχολικό εργαστήριο εξοικειώνεται με το χειρισμό των μέσων και των διατάξεων, μαθαίνει τους κανόνες ασφαλείας και μέσω της καθοδηγούμενης ανακάλυψης, δουλεύοντας σε ομάδες, εκτελεί 10 χημικές αντιδράσεις γράφοντας και κατανοώντας τις αντίστοιχες χημικές εξισώσεις, τις παρατηρήσεις που προκύπτουν από το πείραμα, και απαντά σε κάποιες ερωτήσεις αξιολόγησης. Τέλος αυτή η διαδικασία ολοκληρώνεται με την αντιμετώπιση από το μαθητή ενός άγνωστου προβλήματος στο εργαστήριο το οποίο καλείται να μελετήσει και να επιλύσει, αναπτύσσοντας μία στρατηγική επίλυσης που μέσω της υλοποίησης της δίνει τις απαντήσεις. Σε κάθε φάση του εργαστηριακού μέρους γίνεται ανατροφοδότηση μέσω αναλυτικής συζήτησης με τους μαθητές.

Μια πρώτη εφαρμογή της διδακτικής πρότασης πραγματοποιήθηκε στο 2^ο ΓΕΛ Γαλασίου, Τμήμα: Α5, στο 2^ο τετράμηνο 2020, με τη συμμετοχή 21 μαθητών, από την οποία βγήκαν ιδιαίτερα ενθαρρυντικά συμπεράσματα το οποία και θα παρουσιαστούν.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

Μαυρόπουλος Μάκης Σ. (1997), *Διδάσκω Χημεία, Διδακτική Μεθοδολογία–Η διδασκαλία της Χημείας*, εκδόσεις Σαββάλας, Αθήνα
<https://www.aqa.org.uk/subjects/science/gcse/chemistry-8462>

Έρευνα πεδίου εφαρμογών της Επικοινωνίας της Επιστήμης

Ασημέλλης Ε., Γιαννακουδάκης Π.

Εργαστήριο Χημικής Εκπαίδευσης, Εφαρμογής Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνιών στη Χημεία, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: stratos@asimellis.gr panjian@chem.auth.gr

Η Επικοινωνία της Επιστήμης (ΕτΕ) αποτελεί μέσο για τη σύνδεση της επιστημονικής μεθοδολογίας, των αποτελεσμάτων της έρευνας και της κοινωνίας.

Οι αυξημένες ανάγκες για πληροφόρηση του κοινού σχετικά με τις επιστημονικές ανακαλύψεις, οδηγεί σε διαρκή εμπλουτισμό των μέσων και των τρόπων για την ΕτΕ. Ωστόσο για να είναι επιτυχής η ενσωμάτωση των νέων μέσων και τεχνικών, θα πρέπει να συνοδεύεται από επιστημονική έρευνα και ανάλυση του κοινού και της εμπειρίας που αυτό αποκομίζει από την διεπαφή του με κάποιο από τα μέσα της ΕτΕ, αλλά και τον έλεγχο του ποσοστού αποδοχής και εκπλήρωσης των προσδοκιών που το κοινό είχε.

Στο πλαίσιο της Διδακτορικής μας έρευνας με αντικείμενο την ΕτΕ, με αφορμή την επέτειο συμπλήρωσης εκατόν πενήντα ετών από την επινόηση του Περιοδικού Πίνακα, σχεδιάσαμε, προγραμματίσαμε, διοργανώσαμε και πραγματοποιήσαμε στις 2 και 3 Νοεμβρίου 2019 μια μεγάλη γιορτή της Επιστήμης με τον τίτλο «Ωρα Χημείας» σε συνεργασία με την Ένωση Ελλήνων Χημικών, στο εμπορικό κέντρο The Mall Athens στο Μαρούσι Αττικής.

Η εκδήλωση περιλάμβανε πλήθος από δράσεις αξιοποίησης της ΕτΕ. Κεντρικός σκοπός της εκδήλωσης ήταν η ανάδειξη της αξίας του Περιοδικού Πίνακα στη μελέτη των Χημικών Στοιχείων. Για κάθε δράση προηγήθηκε στοχευμένη επιλογή του μέσου της ΕτΕ το οποίο θα αξιοποιούνταν ώστε να επιτευχθεί η ενεργός συμμετοχή του κοινού.

Ενδεικτικά αναφέρουμε τις ακόλουθες δράσεις που υλοποιήθηκαν:

- Κατασκευή του Περιοδικού Πίνακα με cupcakes.
- Πραγματοποίηση του παιχνιδιού «Periodic Table(t)» μέσω της ομώνυμης εφαρμογής που σχεδιάστηκε για κινητά τηλέφωνα σε περιβάλλον Android.
- Παρουσίαση εντυπωσιακών πειραμάτων Χημείας.
- Ενημερωτικές παρουσιάσεις για ζητήματα αιχμής στην εξέλιξη της Χημείας και τη συμβολή της στο σχεδιασμό των φαρμάκων.
- Κατασκευή του μεγαλύτερου Περιοδικού Πίνακα από τουβλάκια Lego στην Ελλάδα, φτιαγμένο με περισσότερα από 70.000 τεμάχια.

Τα περίπτερα της εκδήλωσης στο εμπορικό κέντρο, τίμησαν με την επίσκεψή τους περισσότεροι από 9000 ενδιαφερόμενοι. Συνελέγησαν 233 ερωτηματολόγια εφαρμόζοντας την τεχνική της συστηματικής δειγματοληψίας στους επισκέπτες, με τα οποία ανιχνεύτηκε ο βαθμός ικανοποίησής τους από τον συγκεκριμένο τρόπο προσέγγισής τους με την Επιστήμη και η εν γένει στάση τους ως προς την ΕτΕ.

Διερεύνηση ιδεαλιστικών αντιλήψεων μαθητών λυκείου – Συσχέτιση με το επίπεδο γνώσεων στις Φυσικές Επιστήμες

Αδάμ Κ¹., Κεσίδου Κ¹., Ακρίβος Π¹.

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

Το αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής διατριβής υπήρξε η διερεύνηση των ιδεαλιστικών αντιλήψεων μαθητών Λυκείου και δευτερευόντως την συσχέτιση με το επίπεδο γνώσεων τους στις Φυσικές Επιστήμες. Οι απόψεις τους διερευνήθηκαν χρησιμοποιώντας ένα ερωτηματολόγιο με ερωτήσεις κυρίως κλειστού τύπου, το οποίο περιελάμβανε: α) ερωτήματα που διερευνούν τις ιδεαλιστικές αντιλήψεις των μαθητών, β) ερωτήματα που αφορούν τα μαθήματα κυρίως της Χημείας και σε μικρότερη έκταση της Φυσικής και των Μαθηματικών τα οποία ήταν βασισμένα στην τρέχουσα σχολική ύλη και γ) ερωτήματα που αφορούν επιστημονικές ανακαλύψεις, οι οποίες όταν παρουσιάστηκαν βοήθησαν την ανθρωπότητα να απαλλαγεί από τον σκοταδισμό και την δεισιδαιμονία. Στη μελέτη συμμετείχαν μαθητές Λυκείου που φοιτούσαν σε σχολεία αστικών και μη αστικών κέντρων, καθώς και ιδιωτικό και πειραματικό σχολείο. Η διαστρωμάτωση αυτή των σχολικών μονάδων έχει ως στόχο την καλύτερη αποτίμηση του αποτελέσματος που έχουν διάφοροι κοινωνικό-οικονομικοί παράγοντες στη δημιουργία και διατήρηση αντιλήψεων σχετικών με την καθημερινότητα αλλά και την επιστημονική γνώση.

Εξέλιξη των ιδεών φοιτητών χημείας σχετικά με την απεικόνιση μιας χημικής αντίδρασης

Παπαδόπουλος Χ.Ν., Ακρίβος Π.Δ., Κατκαρίδου Π.
Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη.
e-mail: 1papadocn@gmail.com

Η μελέτη αναφέρεται στις απόψεις και τις ιδέες των μελλοντικών εκπαιδευτικών σχετικά με την αφηρημένη συμβολική παρουσίαση του κύριου θέματος για τη Χημεία, της χημικής αντίδρασης. Οι απόφοιτοι Α.Ε.Ι. που πληρούν τις προϋποθέσεις για τη διδασκαλία σε μαθητές δευτεροβάθμιας εκπαίδευσης πρέπει να κάνουν χρήση αυτών των παραστάσεων σ' όλη τη διάρκεια του εκπαιδευτικού προγράμματος που καλούνται να υπηρετήσουν. Φυσικά ο κάθε δάσκαλος μπορεί να διδάξει αποτελεσματικότερα εκείνα τα αντικείμενα που κατέχει καλύτερα και θα τα διδάξει κυρίως με τον τρόπο που κι αυτός τα αντιλαμβάνεται. Η έρευνα είχε στόχο να παρακολουθήσει την εξέλιξη των ιδεών των προπτυχιακών και μεταπτυχιακών φοιτητών του τμήματος Χημείας σχετικά με την εικονική αναπαράσταση μιας απλής χημικής αντίδρασης. Η αντίδραση της σύνθεσης νερού ορίστηκε ως στόχος και οι συμμετέχοντες ενθαρρύνθηκαν να χρησιμοποιήσουν οποιαδήποτε διαθέσιμη πηγή, συμπεριλαμβανομένων ιστοσελίδων.

Ο πληθυσμός που συμμετέχει στη μελέτη παρακολουθεί το ίδιο εκπαιδευτικό πρόγραμμα στο Πανεπιστήμιο και η εξέλιξη των ιδεών τους σχετικά με τον καλύτερο διδακτικό τρόπο για την περιγραφή του σχηματισμού νερού αντανακλά το βαθμό στον οποίο έχουν αφομοιώσει τη γνώση που τους παρέχεται μέσω αυτού. Η κατηγοριοποίηση των απαντήσεων με τον καθορισμό συγκεκριμένων βασικών σημείων στο περιεχόμενό τους, όπως η σχεδίαση ατόμων στην αντίστοιχη κλίμακα, το συνολικό σχήμα των μορίων, οι πρόσθετες πληροφορίες που παρέχονται κ.λπ. παρείχαν σαφείς αποδείξεις για το ότι η σταδιακή εισαγωγή σε χημικές πτυχές τροποποιεί τη στάση των φοιτητών του πανεπιστημίου έναντι των μέσων με τα οποία περιγράφονται βασικές χημικές πληροφορίες.

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Χημική Αντίδραση, Νοητικά Μοντέλα, Μαθήματα Χημείας, Χημική απεικόνιση.

Μελέτη της καταλυόμενης αντίδρασης τριών συστατικών για τη σύνθεση πυρρολο-παραγώγων των αμινοξέων

Γεωργαντάς Δ., Ανδρέου Δ., Λυκάκης Ι.*

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη 54124,
Θεσσαλονίκη

*e-mail: dimgeorga@hotmail.gr, lykakis@chem.auth.gr

Οι ετεροκυκλικές ενώσεις έχουν ιδιαίτερη σημασία για βιολογική και βιομηχανική εφαρμογή. Μεταξύ αυτών, το πυρρόλιο είναι άξιο προσοχής και μελέτης λόγω της ποικιλίας των εφαρμογών που παρουσιάζει σε θεραπευτικά δραστικές ενώσεις, συμπεριλαμβανομένων αντιβιοτικών, αντιφλεγμονωδών φαρμάκων και αντικαρκινικών παραγόντων. Επίσης, αποτελεί βασικό συστατικό της πλευρικής αλυσίδας των υπολειμμάτων L-τροπτοφάνης, με συνέπεια την παρουσία του σε λειτουργικές πρωτεΐνες του οργανισμού, καθώς και των πορφυρινών της αίμης.^[1] Οι συνθέσεις Paal-Knorr, Hantzsch, Knorr και Barton – Zard διακρίνονται ως οι κύριες συνθέσεις πυρρολίων. Ειδικότερα, τα πυρρολικά παράγωγα αμινοξέων αποτελούν ιδιαίτερα σημαντικές πρώτες ύλες για την σύνθεση μιας ποικιλίας βιολογικά ενεργών ενώσεων.^[2] Στη βιβλιογραφία εντοπίζονται δύο κύριες συνθετικές προσεγγίσεις: α) η N-αλκυλίωση πυρρολίων με χειρόμορφα αντιδραστήρια και β) ο σχηματισμός του πυρρολικού δακτυλίου χρησιμοποιώντας χειρόμορφα πρόδρομα μόρια, όπου είναι δυνατό να μεταφέρουν το χειρικό τους κέντρο στο προϊόν.^[3] Μια πρόσφατη μεθοδολογία σύνθεσης πολυ-υποκατεστημένων πυρρολίων περιλαμβάνει αντίδραση τριών συστατικών, α-μεθυλο-υποκατεστημένων αλδεϋδών, αμινών και β-νιτροαλκενίων καταλυόμενη από ενώσεις χαλκού, μέσω μιας μετάθεσης 1,2-φαινυλίου/αλκυλίου.^[4] Το συγκεκριμένο συνθετικό πρωτόκολλο επεκτείνεται στην παρούσα εργασία, όπου μελετάται η σύνθεση πυρρολικών παραγώγων αμινοξέων. Η προτεινόμενη καταλυτική μεθοδολογία αναπτύσσεται σε ήπιες συνθήκες και στα πλαίσια της αιεφόρας ανάπτυξης, με παραγωγή των αντίστοιχων πυρρολο-παραγώγων σε καλές αποδόσεις.^[5]

[1] a) Gholap S. S. *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *110*, 13-31, b) Bhardwaj V., Gumber D., Abbot V., Dhiman S., Sharma P. *RSC Adv.* **2015**, *5*, 15233-15266, c) Walsh C. T., Gameau-Tsodikova S., Howard-Jones A. *R. Nat. Prod. Rep.* **2006**, *23*, 517-531.

[2] Jefford C. W. Naide F., Sienkiewicz de V.K. *Tetrahedron Asymmetry* **1996**, *7*, 1069.

[3] Ryzhkov O. I., Andreev A. I., Belov M. G., Kurkin V. A., Yurovskaya A. M. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*, **2011**, *47*, 182-193.

[4] Andreou D., Kallitsakis G. M., Loukopoulos E., Gabriel C., Kostakis E. G., Lykakis N. I. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 2104-2113.

[5] Financial supports by the project "OPENSREEN-GR" (MIS 5002691) which is implemented under the Action "Reinforcement of the Research and Innovation Infrastructure" (NSRF 2014-2020) and co-financed by Greece and the European Union (KA94150).

3,4-συμπυκνωμένα Ν-ούχα ετεροκυκλικά παράγωγα κουμαρινών: Σύνθεση και βιολογικές ιδιότητες

Καπίδου Ε., Λίτινας Κ.*

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη 54124, Θεσσαλονίκη
*e-mail: ekapidou@chem.auth.gr, klitinas@chem.auth.gr

Η παρούσα εργασία αφορά τη σύνθεση και τη μελέτη των βιολογικών ιδιοτήτων των 3,4-συμπυκνωμένων Ν-ούχων ετεροκυκλικών παραγώγων κουμαρινών. Βάση βιβλιογραφικών αναφορών συλλέχθηκαν πληροφορίες αναφορικά με μεθόδους σύνθεσης κουμαρινικών παραγώγων και αξιολόγησης ως προς την βιοδραστικότητά τους. Συγκεκριμένα, οι δακτύλιοι που εξετάστηκαν σύμφωνα με βιβλιογραφικά δεδομένα, είναι πύρρολο-, πυράζολο-, ιμιδάζολο-, πυρίδινο-, κινολινο-, πυριμιδινο-, και θειαζέπινο-κουμαρινών. Οι πύρρολοκουμαρίνες συντέθηκαν από σύζευξη 4-βρωμοκουμαρίνης και υποκατεστημένης ανιλίνης υπό ακτινοβολία μικροκυμάτων. Το παλλάδιο παρουσίασε ισχυρή επίδραση στην αντίδραση, αυξάνοντας την απόδοση των προϊόντων. Τα παράγωγα εμφάνισαν αναστολή της λιποξυγονάσης και αντιοξειδωτική δράση.

Η επικρατέστερη μέθοδος σύνθεσης των πυραζολοκουμαρινών είναι η αντίδραση της 4-χλωροκουμαρίνης με παράγωγα της υδραζίνης. Οι υποκαταστάτες αποδείχθηκαν καθοριστικοί στην βιοδραστικότητα των παραγώγων, παρουσιάζοντας αντιμυκητιακή, αντιβακτηριδιακή και αντικαρκινική δράση.

Τα παράγωγα των ιμιδαζολοκουμαρινών αποδείχθηκαν ισχυροί αντικαρκινικοί παράγοντες και παρασκευάστηκαν ύστερα από πολυσταδιακή αντίδραση της 3-νιτρο-4-χλωροκουμαρίνης με μια αμίνη. Εντοπίστηκαν πολλές μέθοδοι σύνθεσης των πυριδινικοκουμαρινών, και η κάθε μέθοδος οδήγησε στην διαφορετική δράση των παραγώγων απέναντι στα βιολογικά υποστρώματα. Συγκεκριμένα, παρουσιάστηκαν αντιβακτηριδιακές, αντιμυκητιακές και αντικαρκινικές ιδιότητες.

Για τη σύνθεση των κινολινο- παραγώγων της κουμαρίνης απαιτείται η παρουσία αλδεΐδης είτε υποκατεστημένης στην 3 θέση της κουμαρίνης είτε ως βενζαλδεΐδη. Αυτά τα παράγωγα εξετάστηκαν στην καταπολέμηση του καρκίνου σε αρκετά καρκινικά κύτταρα, παρουσιάζοντας ισχυρή κυτταροτοξική δράση ανάλογα με τους υποκαταστάτες των αντιδρώντων της κάθε μεθόδου σύνθεσης.

Ένας από τους σημαντικότερους αζωτούχους ετεροκυκλικούς δακτυλίους είναι αυτός της πυριμιδίνης. Η κύρια μέθοδος σύνθεσης τέτοιων παραγώγων είναι με συμπύκνωση δύο βενζαλδεΐδων και κυανοξικού εστέρα, παρουσία οξικού αμμωνίου. Η αξία της πυριμιδίνης στη βιοχημεία αντικατοπτρίζεται στην πληθώρα βιολογικών ιδιοτήτων που έδειξαν οι πυριμιδινικοκουμαρίνες, δηλαδή αντικαρκινικές, αντιθρομβωτικές, αντιοξειδωτικές, και αντιβακτηριδιακές.

Τα προϊόντα της αντίδρασης μιας υποκατεστημένης 4-υδροξυκουμαρίνης με την 2-αμινο-αιθανοθειόλη είναι οι θειαζέπινικοκουμαρίνες. Ο κουμαρινικός σκελετός και ο δακτύλιος της θειαζέπίνης συμπυκνωμένοι, αποδείχθηκαν σημαντικοί αντικαρκινικοί και αντιοξειδωτικοί παράγοντες.

Τέλος, κουμαρινικά παράγωγα με συμπυκνωμένο δακτύλιο 2-ιμινο-θειαζολιδιν-4-όνης συντέθηκαν ύστερα από αντίδραση της 4-αμινοκουμαρίνης με χλωροακετυλοχλωρίδιο και στη συνέχεια κυκλοποίηση του ενδιαμέσου με θειοκυανικό αμμώνιο. Τα προϊόντα παρουσίασαν σημαντικές αντικαρκινικές ιδιότητες.

Καταλυτική μελέτη σύνθεσης υποκατεστημένων N-αρυλοιμιδαζολίων από νιτρίλια και αμίνες

Σιακαβάρης Ν., Καλλιτσάκης Μ., Λυκάκης Ι.*

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη 54124, Θεσσαλονίκη

*e-mail: nsiakabaras@gmail.com, lykakis@chem.auth.gr

Οι 2-ιμιδαζολίνες είναι πενταμελείς ετεροκυκλικές ενώσεις, οι οποίες παρουσιάζουν ευρύ βιολογικό και βιομηχανικό ενδιαφέρον. Έχει βρεθεί ότι αποτελούν τμήματα φυσικών προϊόντων και φαρμάκων έναντι διαφόρων παθήσεων όπως ο καρκίνος, η υπέρταση, η υπεργλυκαιμία το HIVκ.α.^[1] Επίσης, χρησιμοποιούνται στη βιομηχανία είτε ως χειρόμορφοι καταλύτες σε αντιδράσεις όπως Michael, Diels-Alder κλπ, είτε ως ενδιάμεσα για τη σύνθεση άλλων ετεροκυκλικών μορίων όπως τα ιμιδαζόλια. Η σύνθεση αυτών των ενώσεων έχει επιτευχθεί με διάφορους τρόπους, η κατηγοριοποίηση των οποίων χωρίζεται με βάση την πρώτη ύλη και περιλαμβάνει τις ενώσεις, 1,2-διαμίνες, β-υδροξυαμίδια, ισοκυανίδια και ιμίνες, N-ακυλοδιαμίνες, αζιριδίνες, άζαλακτονες και αλκένια.^[2,3] Στην περίπτωση των 1,2-διαμινών χρησιμοποιούνται κυρίως ως αρχικές ενώσεις καρβοξυλικά οξέα, εστέρες, αλδεΐδες και ελάχιστα τα νιτρίλια.^[4] Η αντίδραση των νιτρίλιων με τις 1,2-διαμίνες έχει παρατηρηθεί στη βιβλιογραφία ότι επιτυγχάνεται με τη χρήση τριών καταλυτικών συστημάτων: α) με ενώσεις του θείου, β) με ενώσεις ή νανοσωματίδια του χαλκού και γ) με αντιδραστήρια που δρουν κατά κύριο λόγο ως οξέα Lewis. Στην παρούσα εργασία γίνεται μελέτη ανάπτυξης μιας καταλυτικής μεθοδολογίας σύνθεσης N-αρυλοιμιδαζολινών από νιτρίλια και διαμίνες, με τη χρήση καταλυτών μετάλλων όπως (Au, Ag ή Co) στα πλαίσια της παραγοντοποίησης νιτρίλιων και της μετατροπής τους σε ετεροκυκλικές ενώσεις με πιθανό βιολογικό ενδιαφέρον.^[5]

[1] C. Dardonville, I. Rozas, *Medicinal Research Reviews*, **2004**, 24, 5, 639-661

[2] H. Liu, D.M. Du, *Adv. Synth. Catal.*, **2009**, 351, 489-519

[3] Md Mehedi, J.J. Tepe, *Adv. Synth. Catal.*, **2020**, 1-37

[4] S. An, B. Yin, P. Liu, X. Li, C. Li, J. Li, Z. Shi, *Synthesis*, **2013**, 45, 2525-2532

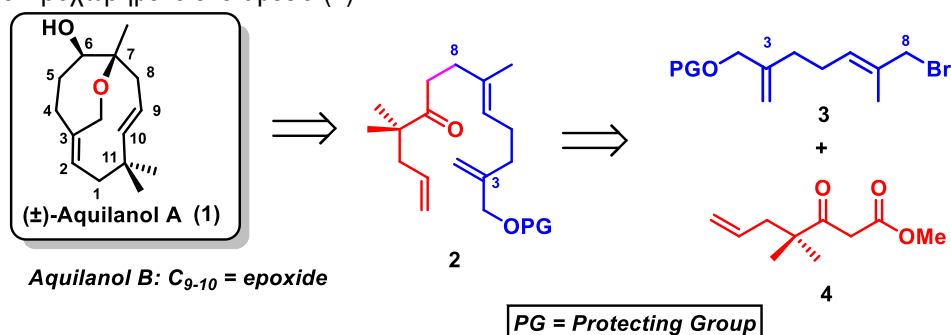
[5] Financial supports by the project "OPENSREEN-GR" (MIS 5002691) which is implemented under the Action "Reinforcement of the Research and Innovation Infrastructure" (NSRF 2014-2020) and co-financed by Greece and the European Union (KA94150).

Βελτιστοποιημένη σύνθεση δύο τμημάτων του ανθρακικού σκελετού των Ακιλανολών Α και Β

Αθανασιάδου Θ., Σταθάκης Χ.

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: t.athanassiadou@gmail.com

Οι Ακιλανόλες Α και Β απομονώθηκαν το 2017 από τη ρητίνη *agarwood* των δέντρων του είδους *Aquilaria malaccensis*, τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν ως φαρμακευτικά φυτά. Από χημικής άποψης, ανήκουν στην κατηγορία των σесκιτερπενίων, ενώ βρέθηκε πως φέρουν μια ασυνήθιστη μακροκυκλική δομή χουμουλενίου με ένα δικυκλικό 7/10 σύστημα δακτυλίων (Σχήμα 1).^[1] Στα πλαίσια της πρώτης ολικής σύνθεσης των Ακιλανολών Α και Β πραγματοποιήθηκε η πτυχιακή εργασία με τίτλο «Βελτιστοποιημένη σύνθεση δύο τμημάτων του ανθρακικού σκελετού των Ακιλανολών Α και Β». Πιο συγκεκριμένα, στόχος της πτυχιακής εργασίας ήταν η βελτιστοποίηση της σύνθεσης των τμημάτων C3-C8(2) και C9-C2(4) του ανθρακικού σκελετού των φυσικών προϊόντων, καθώς και η μεταξύ τους σύνδεση. Πράγματι, οι δύο αυτοί επιμέρους στόχοι συντέθηκαν σε 5 και 2 στάδια αντίστοιχα, σε καλές αποδόσεις, ενώ η μεταξύ τους αντίδραση οδήγησε στο προχωρημένο ενδιάμεσο (2).



Σχήμα 1 Γενικευμένη ρετροσυνθετική ανάλυση Ακιλανόλης Α.

[1] C.T. Ma, T.Eom, E. Cho, B. Wu, T.R. Kim, K.B. Oh, S.B. Han, S.W. Kwon, J.H. Park *J. Nat. Prod.*, **2017**, *80*, 3043–3048, DOI: 10.1021/acs.jnatprod.7b00462.

Σύνθεση 3-καρβοξυ-πυριδινών μέσω διαδοχικής υδροαμίνωσης/οξειδωτικής κυκλοποίησης προπαργυλο εστέρων με προπαργυλαμίνη καταλυόμενη από AuNPs

Μπένα Α., Λυκάκης Ι.*

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη, 54124, Θεσσαλονίκη

*e-mail: alexvena03@hotmail.com, lykakis@chem.auth.gr

Από τα μέσα του περασμένου αιώνα, τα πυριδινικά παράγωγα καταλαμβάνουν σημαντικό χώρο στη χημεία των βιολογικών συστημάτων. Κατέχουν βασικό ρόλο στην κατάλυση τόσο βιολογικών όσο και χημικών συστημάτων και αποτελούν τον θεμελιώδη σκελετό σημαντικών βιταμινών. Στην φαρμακοβιομηχανία, ο πυριδινικός δακτύλιος αποτελεί τον πυρήνα περισσότερων από 7000 φαρμάκων ενώ η παρουσία του σε αγροχημικά είναι εξίσου εκτεταμένη. Στην συνθετική οργανική χημεία, οι πυριδίνες χρησιμοποιούνται εκτενώς ως ligands, όπως οι διπυριδίνες και οι τριπυριδίνες που διαθέτουν εξαιρετική ικανότητα συμπλοκοποίησης με διάφορα μεταλλικά ιόντα, όπως το ρουθίνιο, τον ψευδάργυρο και το χαλκό. Αυτά τα λειτουργικά ligands έχουν βρει ένα πλήθος εφαρμογών όπως είναι συστήματα αισθητήρων, εναντιοεκλεκτική σύνθεση, φωτοδιαύγεια, πεπτιδική σύνθεση και ως δομικά στοιχεία για την υπερμοριακή χημεία.^[1,2] Ο στόχος της παρούσας διπλωματικής περιλαμβάνει την σύνθεση υποκατεστημένων 3-καρβοξυ-πυριδινικών παραγώγων^[3] μέσω διαδοχικών αντιδράσεων, υδροαμίνωσης προπαργυλο εστέρων με την προπαργυλαμίνη και 6-endo dig κυκλοποίησης καταλυόμενη από νανοσωματίδια χρυσού.^[4]

[1] J. A. Varela, C. Saa, *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 3787–3801.

[2] G. D. Henry, *Tetrahedron* **2004**, *60*, 6043–6061.

[3] M. Fragkiadakis, M. Kidonakis, L. Zorba, M. Stratakis, *Adv. Synth. Catal.* **2020**, *362*, 964–968.

[4] Financial supports by the project “OPENSREEN-GR” (MIS 5002691) which is implemented under the Action “Reinforcement of the Research and Innovation Infrastructure” (NSRF 2014-2020) and co-financed by Greece and the European Union (KA94150).

Αερόβια εποξειδωση αλκενίων καταλυόμενη από 2,5-δικετοπιπεραζίνη

Ορφανίδου Μ., Πετσή Μ., Ζωγράφος Α.

*Εργαστήριο Οργανικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
Πανεπιστημιούπολη 54124, Θεσσαλονίκη*

e-mail: : mariaorfan97@gmail.com, petsmari@chem.auth.gr, alzograf@chem.auth.gr

Σκοπός της παρούσας μελέτης είναι η εύρεση μιας μεθόδου για την αερόβια εποξειδωση αλκενίων καταλυόμενη από 2,5-δικετοπιπεραζίνη με μοριακό οξυγόνο ως το τελικό οξειδωτικό.

Δεδομένου ότι τα εποξειδία αποτελούν εξαιρετικά ενδιάμεσα για τη σύνθεση μιας πληθώρας οργανικών προϊόντων, κατά καιρούς έχουν προταθεί ποικίλες συνθετικές μέθοδοι με κύριο στόχο την επίτευξη ικανοποιητικών αποδόσεων και την χρήση συνθηκών και μέσων όσο το δυνατόν περισσότερο φιλικών προς το περιβάλλον. Πολλές από αυτές τις συνθετικές πορείες κάνουν χρήση υπεροξέων στο ρόλο των οξειδωτικών παραγόντων και συμπλόκων μετάλλων ως καταλυτών, αντιδραστήρια τα οποία συχνά απαιτούν ειδικό χειρισμό και οδηγούν στον σχηματισμό μη επιθυμητών παραπροϊόντων.

Μεριμνώντας τα ανωτέρω, στόχος μας είναι η ανάπτυξη μιας μεθόδου σύνθεσης εποξειδίων από αλκένια χρησιμοποιώντας ως μοναδικό οξειδωτικό το μοριακό οξυγόνο. Μελετώντας τον τρόπο δράσης των μονοξυγενασών θελήσαμε να βρούμε το κατάλληλο διπεπτιδίο το οποίο θα μπορούσε να λειτουργήσει ως μεταφορέας του οξυγόνου και να το ενσωματώσει στο υπόστρωμα.

Έτσι, προτείνουμε τη χρήση μιας 2,5-δικετοπιπεραζίνης ως καταλύτη της αντίδρασης. Πρόκειται για μία οικολογική μέθοδο που απαιτεί ήπιες συνθήκες και δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα στην εποξειδωση αλκενίων.

Συνθετικές προσεγγίσεις των φυσικών προϊόντων oleocanthal και inohanalactone

Μπάγκαβου Γ., Γάλλος Ι.

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: georgiabagavou@gmail.com, igallos@chem.auth.gr

Στο πρώτο τμήμα της παρούσας εργασίας επιχειρήθηκε η σύνθεση του φυσικού προϊόντος Ελαιοκανθάλη. Πρόκειται για μια μη στεροειδή, αντιφλεγμονώδη ένωση, η οποία βρίσκεται στο Εξαιρετικά Παρθένο Ελαιόλαδο. Η Ελαιοκανθάλη παρουσιάζει ιδιαίτερο συνθετικό ενδιαφέρον καθώς εμφανίζει πληθώρα φυσικών και φαρμακολογικών ιδιοτήτων, συμβάλλοντας στην βελτίωση της υγείας.

Η συνθετική πορεία ξεκίνησε από την εμπορικά διαθέσιμη 5,6-διυδροπυραν-2-όνη, απ' όπου με αντίδραση 1,4-προσθήκης σχηματίστηκε ο ανθρακικός σκελετός του επιθυμητού προϊόντος. Όμως, μετά από τρία στάδια τα αποτελέσματα δεν ήταν τα αναμενόμενα, οπότε δοκιμάστηκαν διαφορετικές συνθετικές πορείες, από την ίδια πρώτη ύλη, χωρίς ωστόσο να επιτευχθεί η σύνθεση του τελικού προϊόντος.

Το δεύτερο τμήμα της εργασίας αφορά το φυσικό προϊόν Ινοχαναλακτόνη, που απομονώθηκε πρόσφατα από ένα βακτήριο του γένους *Nocardia*, και οι βιολογικές δράσεις της ένωσης δεν έχουν ακόμη διευκρινιστεί. Στόχο στο κομμάτι αυτό, αποτέλεσε η σύνθεση του εναντιομερούς της Ινοχαναλακτόνης, ξεκινώντας από την εμπορικά διαθέσιμη D-ριβόζη.

Αρχικά, στο θεωρητικό μέρος, αναφέρονται κάποια γενικά στοιχεία για την κάθε ένωση. Για την Ελαιοκανθάλη περιγράφεται, επίσης, ο βιολογικός ρόλος της, μέσω μελετών των φαρμακολογικών ιδιοτήτων της, η δράση της εναντίον διαφόρων ασθενειών καθώς και προηγούμενες βιβλιογραφικές συνθετικές προσεγγίσεις.

Έπειτα, στο πειραματικό μέρος, αναπτύσσονται και αναλύονται λεπτομερώς οι συνθετικές πορείες που ακολουθήθηκαν καθώς και οι τρόποι αντιμετώπισης των προβλημάτων που προέκυψαν.

Ηλεκτροχημική οξείδωση Cr(III) από προσομοιωμένα και πραγματικά απόβλητα βυρσοδεψίων σε ηλεκτρόδια PbO₂

A. Ο. Γραμμένος^{1*}, A. Μπαντή¹, E. Κόκκινος², A. Ζουμπούλης², Σ. Σωτηρόπουλος¹

1 Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας,

Σχολή Θετικών Επιστημών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Ελλάδα

2 Εργαστήριο Χημικής και Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας,

Σχολή Θετικών Επιστημών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Ελλάδα

e-mail: asgrammen@chem.auth.gr, orestisgram@gmail.com

Περίληψη

Για την ηλεκτροχημική οξείδωση προσομοιωμένων και πραγματικών λυμάτων βυρσοδεψίας Cr(III) παρασκευάστηκαν ηλεκτροκαταλύτες PbO₂ σε υποστρώματα Pb, Ti και Γραφίτη. Η παρασκευή πραγματοποιήθηκε με ποτενσιοστατική ανοδίσωση για το υπόστρωμα Pb και με γαλβανοστατική απόθεση PbO₂ για τα υποστρώματα Ti, Γραφίτη. Ακολούθησε ηλεκτροχημικός χαρακτηρισμός και σύγκριση των ηλεκτροκαταλυτών, καθώς και αξιολόγηση της ηλεκτροκαταλυτικής τους ικανότητας όσον αφορά την οξείδωση του Cr(III) με τη μέθοδο κυκλικής βολταμετρίας. Η αντίδραση βρέθηκε να λαμβάνει χώρα στο εύρος δυναμικού 1.5-1.75V. Επιβεβαιώθηκε η καταλληλότητα του PbO₂ ως ηλεκτροενεργού συστατικού για τη συγκεκριμένη αντίδραση, λόγω της καταλυτικής του ικανότητας και της εκλεκτικότητάς του προς την οξείδωση Cr(III) → Cr(VI) έναντι της αντίδρασης έκλυσης οξυγόνου που λαμβάνει χώρα σε παραπλήσια δυναμικά. Ύστερα από το βασικό χαρακτηρισμό των ηλεκτροκαταλυτών σε ηλεκτρόδια δίσκων, παρασκευάστηκαν ηλεκτροκαταλύτες σε φύλλα Pb, Ti, Γραφίτη, για την γαλβανοστατική οξείδωση πραγματικών λυμάτων Cr(III) υπό διαφορετικές συνθήκες (εφαρμοζόμενο ρεύμα 0.5, 1A, pH= 0, 1.27, 3). Για τους ηλεκτροκαταλύτες σε υποστρώματα Ti, Γραφίτη δεν παρατηρήθηκε μετατροπή Cr(III)→ Cr(VI). Για το υπόστρωμα Pb σημειώθηκαν μετατροπές 10%, 19%, 43% για 8 ώρες ηλεκτρόλυσης και εφαρμοζόμενο ρεύμα 0.5A σε τιμές pH 0, 1.27, 3 αντίστοιχα.

Ευχαριστίες

Η εργασία αυτή υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Πράξης «Invalor: Ερευνητική υποδομή για την αξιοποίηση αποβλήτων και Αειφόρου Διαχείρισης Φυσικών πόρων» (MIS 5002495) που εντάσσεται στη Δράση «Ενίσχυση των Υποδομών Έρευνας και Καινοτομίας» και χρηματοδοτείται από το Επιχειρησιακό Πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία» στο πλαίσιο του ΕΣΠΑ 2014-2020, με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης (Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης).

Έκλυση οξυγόνου/οξειδωση νερού σε ηλεκτρόδια σκόνης και νανοσωλήνων TiO₂

Ο.Ν.Σπυρίδου*, Α.Τούνη, Σ.Σωτηρόπουλος

Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Ελλάδα

e-mail: nikiolga9@gmail.com

Παρασκευάστηκαν καταλύτες νανοσωματιδίων οξειδίου του ιριδίου υποστηριζόμενων σε εμπορικά διαθέσιμα σωματίδια TiO₂ (Degussa P-25®) και σε ανοδικά παρασκευασθέντες αυτοοργανωμένους νανοσωλήνες TiO₂ (TNTs) μέσω φωτοαπόθεσης του ευγενούς μετάλλου ή/και οξειδίου του (Ir / IrO₂). Η φωτοαπόθεση έλαβε χώρα σε απαερωμένο, υδατικό διάλυμα 0.002 M K₃IrCl₆ + 0-0.5 M MeOH + 1 M KOH (pH =11), υπό συνεχή ανάδευση και φωτοβολήση με λάμπα υπεριώδους (9W/78 UVA, λ = 350-400 nm), για 2, 5 και 8 h. Μελετήθηκε η επίδραση της συγκέντρωσης της θυσιαζόμενης ένωσης (MeOH) και του χρόνου απόθεσης στη χημική κατάσταση (Ir ή IrO₂) και στο ποσοστό του ευγενούς μετάλλου στον καταλύτη. Η εξέταση της μορφολογίας των παρασκευασθέντων καταλυτών, παραγματοποιήθηκε με ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης (SEM) και η στοιχειακή ανάλυση των δειγμάτων έγινε με φασματοσκοπία ενεργειακής διασποράς ακτίνων X (EDS). Από τις αντίστοιχες μικρογραφίες και φασματοσκοπικά δεδομένα προέκυψε ότι οι καταλύτες που παρασκευάστηκαν χωρίς την παρουσία μεθανόλης στο διάλυμα της φωτοαπόθεσης και στο μέγιστο της εφαρμοζόμενης διάρκειας ακτινοβολήσης (8h), εμφανίζουν μεγαλύτερη επικάλυψη του υποστρώματος καθώς και μεγαλύτερο ποσοστό του αποτιθέμενου μετάλλου. Από την άλλη, η αύξηση της συγκέντρωσης της μεθανόλης στο διάλυμα και η μείωση της εφαρμοζόμενης διάρκειας, είχε λιγότερο αποδοτικά αποτελέσματα. Από την αρνητική επίδραση της μεθανόλης στην απόθεση, συνάγεται ότι ο κύριος μηχανισμός απόθεσης συνίσταται στην οξείδωση Ir(III) του διαλύματος προς Ir(VI), με την δράση των οπών h⁺ της ζώνης σθένους του TiO₂ ή των σχηματιζόμενων εκεί ριζών OH[·] και την απόθεση του ως IrO_x. Η επιφανειακή ηλεκτροχημεία των καταλυτών εμφανίζει χαρακτηριστικά ηλεκτροδίων ανοδικά σχηματιζόμενου IrO₂. Οι καταλύτες IrO₂/TiO₂ εξετάστηκαν ως προς την καταλυτική τους ενεργότητα για την αντίδραση έκλυσης οξυγόνου (OER), με βολταμμετρία γραμμικής σάρωσης (LSV) ημι-σταθερής κατάστασης. Από τα αποτελέσματα προκύπτει, πως ο καταλύτης που παρασκευάστηκε απουσία μεθανόλης και υπό 8h φωτοβολήση, εμφανίζει ενισχυμένη πυκνότητα ρεύματος ανά γεωμετρική επιφάνεια σε σχέση με τους υπόλοιπους, και συγκρίσιμες τιμές με τον εμπορικά διαθέσιμο καταλύτη νανοσωματιδίων IrO₂. Τέλος, οι φωτοπαρασκευασθέντες καταλύτες IrO₂/TNT, εξετάστηκαν ηλεκτροχημικά απουσία φωτός όπου έδειξαν λιγότερο ευκρινή χαρακτηριστικά επιφανειακής ηλεκτροχημείας IrO₂ και σημαντικά μειωμένη καταλυτική ενεργότητα ως προς την OER, πιθανά λόγω κακής διασποράς των νανοσωματιδίων IrO₂ στο ημιαγώγιμο υπόστρωμα TiO₂, άρα και έλλειψη αγωγιμότητας. Ωστόσο, υπό συνθήκες φωτοβολήσης γίνονται εμφανή χαρακτηριστικά μικτής επιφανειακής ηλεκτροχημείας υποστρώματος – ιριδίου.

Ηλεκτροχημική και αντιδιαβρωτική ικανότητα σύνθετων υλικών της πολυανιλίνης με εσωτερική πρόσμειξη σε ανοξείδωτο χάλυβα

Παπαμιχαήλ Δ., Σαζού Δ.

Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
email: pvdimitra@chem.auth.gr

Η πολυανιλίνη (Polyaniline, PANI) και τα παράγωγά της χαρακτηρίζονται ως «ευφυή υλικά», αφού μπορούν να αλληλεπιδρούν με το περιβάλλον, λόγω της εγγενούς αγωγιμότητας που παρουσιάζουν. Ωστόσο, είναι γνωστό ότι η αγωγιμότητα της PANI εξαρτάται από το pH και για $\text{pH} > 4$ τείνει να μειώνεται σημαντικά. Πέρα από τις πιθανές βιολογικές και ιατρικές εφαρμογές στις οποίες η PANI είναι αναγκαίο να βρίσκεται στην αγώγιμη μορφή της σε φυσιολογικό $\text{pH} = 7,4$, οι αντιδιαβρωτικές εφαρμογές της στηρίζονται επίσης στην ικανότητα αυτοϊασης της με την επαναφορά της στη αγώγιμη μορφή της και προϋποθέτει τη σταθερότητα της σε μια ευρεία περιοχή pH [1, 2]. Με την εισαγωγή ιονικών ομάδων στον αρωματικό δακτύλιο της PANI, όπως η $-\text{SO}_3\text{H}$, γίνεται εφικτή η διατήρηση της ηλεκτροχημικής δραστηριότητάς της σε $\text{pH} > 4$. Η PANI με εσωτερική πρόσμειξη συντίθεται με συμπολυμερισμό της ανιλίνης (ANI) με σουλφονικά παράγωγά της. Το συμπολυμερές P(ANI-co-SA), που προέρχεται από συμπολυμερισμός της ANI με το σουλφανιλικό οξύ (sulfanilic acid, SA) παρουσιάζει σημαντική αντιδιαβρωτική προστασία του ανοξείδωτου χάλυβα (Stainless Steel, SS) AISI 304 σε όξινα διαλύματα, απουσία ιόντων Cl^- [3]. Μειονέκτημα των υμενίων P(ANI-co-SA) είναι η μειωμένη αγωγιμότητα. Στην εργασία αυτή έγινε προσπάθεια αύξησης της αγωγιμότητας του P(ANI-co-SA) με προσθήκη πρόσμειξης Ni(II) [4] με ηλεκτροχημική απόθεση ενός σταδίου σε SS από διάλυμα 0.05 M ANI και 0.1 M SA παρουσία διαφορετικών συγκεντρώσεων $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$. Τα φιλμ P(ANI-co-SA)-Ni(II) παρουσιάζουν πράγματι βελτιωμένη ηλεκτροχημική δραστηριότητα σε όξινα και ουδέτερα μέσα. Η ηλεκτροχημική και αντιδιαβρωτική ικανότητα του P(ANI-co-SA)-Ni(II) μελετήθηκε με κυκλική βολταμμετρία και φασματοσκοπία ηλεκτροχημικής εμπέδησης συγκριτικά με το P(ANI-co-SA) και την PANI, που αποτέθηκε σε SS από διάλυμα θειϊκών ίδιου $\text{pH} (= 3.23)$ με το μίγμα συμπολυμερισμού. Πειράματα μεγάλου χρόνου εμπάπτισης σε 0.5 M NaCl δείχνουν ότι το σύνθετο υμένιο P(ANI-co-SA)-Ni(II) διατηρεί την ηλεκτροχημική του δραστηριότητα προστατεύοντας το SS από σημειακή διάβρωση. Η μορφολογία και η σύσταση των υμενίων χαρακτηρίστηκαν με μικροσκοπία ηλεκτρονικής σάρωσης (Scanning Electron Microscopy, SEM) σε συνδυασμό με φασματοσκοπική μέθοδο (EDX).

Βιβλιογραφία

- [1] P. P. Deshpande, N. G. Jadhav, V. J. Gelling, and D. Sazou, "Conducting polymers for corrosion protection: A review," *J. Coatings Technol. Res.*, vol. 11, no. 4, pp. 473–494, 2014, doi: 10.1007/s11998-014-9586-7.
- [2] K. Zhu, J. Li, H. Wang, and G. Fei, "Comparative study on anticorrosion enhancement of carboxylated and sulfonated self-doped polyaniline on waterborne epoxy coating," *J. Macromol. Sci. Part A Pure Appl. Chem.*, vol. 0, no. 0, pp. 1–13, 2020, doi: 10.1080/10601325.2020.1842764.
- [3] K. Michael, C. Prochaska, and D. Sazou, "Electrodeposition of self-doped copolymers of aniline with aminobenzenesulfonic acids on stainless steel. Morphological and electrochemical characterization," *J. Solid State Electrochem.*, vol. 19, no. 10, pp. 2917–2931, 2015, doi: 10.1007/s10008-015-2898-4.
- [4] O. P. Dimitriev, "Doping of polyaniline by transition-metal salts," *Macromolecules*, vol. 37, no. 9, pp. 3388–3395, 2004, doi: 10.1021/ma035677w.

Επίδραση των Ιόντων Βρωμίου στη Σταθερότητα του Ανοδικού Οξειδίου του Τανταλίου

Γκιλή Χ., Σαζού Δ.

Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
email: chrysagkili@gmail.com

Ανάμεσα στα μεταβατικά μέταλλα, το Ta θεωρείται ως το πλέον ανθεκτικό στη διάβρωση. Αυτό οφείλεται στον αυθόρμητο σχηματισμό σταθερού και συνεκτικού επιφανειακού οξειδίου (Ta_2O_5), το οποίο προσδίδει στο Ta εξαιρετική σταθερότητα σε διαβρωτικά μέσα. Λόγω των ιδιοτήτων αυτών, το Ta απαντάται ως βιολογικό σε πολλές εφαρμογές βιολογικού και ιατρικού ενδιαφέροντος, αλλά και σε υπερπυκνωτές, σε αισθητήρες αερίων κ.α [1, 2]. Το παθητικό οξείδιο του Ta, με ενεργειακό χάσμα ~ 4.3 eV [3], είναι ημιαγωγός n-τύπου με κυρίαρχες πλεγματικές σημειακές ατέλειες τα κενά οξυγόνου. Η παρουσία των κενών οξυγόνου αποτελεί τη βάση ενός μοντέλου πλεγματικών σημειακών ατελειών (point defect model, PDM) που προτάθηκε για την κατανόηση του μηχανισμού ανάπτυξης του ανοδικού οξειδίου [4]. Έχει παρατηρηθεί ότι οι πλεγματικές σημειακές ατέλειες στο ανοδικό οξείδιο του Ta και άλλων μεταβατικών μετάλλων επηρεάζει σημαντικά την κινητική και τον μηχανισμό ηλεκτροχημικών δράσεων που φαίνεται ότι είτε ενισχύουν την παθητική κατάσταση είτε, υπό ορισμένες συνθήκες, την αποσταθεροποιούν [5]. Η αποσταθεροποίηση της παθητικής κατάστασης και η κατάρρευση της σε μια κρίσιμη τιμή δυναμικού, E_b παρατηρείται παρουσία ιόντων βρωμίου, χωρίς ακόμη να υπάρχει πλήρης κατανόηση του μηχανισμού μέσω του οποίου αυτή προκαλείται. Με στόχο την περαιτέρω κατανόηση της δράσης των ιόντων Br^- στην εργασία αυτή εξετάζεται η ηλεκτροχημική συμπεριφορά του Ta σε διαλύματα διαφορετικών συγκεντρώσεων Br^- , όπου το οξείδιο φαίνεται να καταρρέει τοπικά στο E_b με συνέπεια την εμφάνιση σημειακής διάβρωσης. Το E_b προσδιορίζεται με χρήση βολταμμετρικών καμπυλών ρεύματος-δυναμικού (I-E), στις οποίες η κατάρρευση γίνεται ορατή με την απότομη αύξηση του ρεύματος στο E_b . Με αύξηση της συγκέντρωσης των ιόντων Br^- το E_b μετατοπίζεται σε μικρότερες τιμές, όπως προβλέπεται από το PDM. Για τον χαρακτηρισμό των ηλεκτροχημικών ιδιοτήτων του οξειδίου χρησιμοποιούνται κυκλική βολταμμετρία, φασματοσκοπία ηλεκτροχημικής εμπέδησης και ανάλυση Mott-Schottky.

Βιβλιογραφία:

1. Balliett, R.W., M. Coscia, and F.J. Hunkeler, *Niobium and Tantalum in Materials Selection*. JOM, 1986. **38**(9): p. 25-27.
2. Thind, S.S., et al., *High-performance supercapacitor based on tantalum iridium oxides supported on tungsten oxide nanoplatelets*. Electrochemistry Communications, 2016. **67**: p. 1-5.
3. Cabrera-Sierra, R., et al., *EIS characterization of tantalum and niobium oxide films based on a modification of the point defect model*. Journal of Electroanalytical Chemistry, 2010. **638**: p. 51-58.
4. Macdonald, D.D., *Some personal adventures in passivity—A review of the point defect model for film growth*. Russian Journal of Electrochemistry, 2012. **48**(3): p. 235-258.
5. Sazou, D., K. Saltidou, and M. Pagitsas, *Understanding the effect of bromides on the stability of titanium oxide films based on a point defect model*. Electrochimica Acta, 2012. **76**: p. 48-61.

Ανάπτυξη και μελέτη διατάξεων ηλεκτρόλυσης νερού τύπου πολυμερικής μεμβράνης

Νικόλαος Βασιλείου., Τσιπλακίδης Δ.
Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
email: vnikolap@chem.auth.gr

Περίληψη:

Η παρούσα πτυχιακή εργασία ασχολήθηκε με την παρασκευή συστοιχιών μεμβράνης / ηλεκτροδίων (MEAs), όπου η μεμβράνη αποτελεί το στερεό ηλεκτρολύτη, και εφαρμογή τους σε διάταξη ηλεκτρόλυσης νερού τύπου πολυμερικής μεμβράνης. Συγκεκριμένα, παρασκευάστηκαν δύο MEAs:

1. Ηλεκτρόδιο ανόδου εμπορικής σκόνης IrO₂, καθόδου Pt/C (Hispec 4000) και μεμβράνη Nafion® N212.
2. Ηλεκτρόδιο ανόδου εμπορικής σκόνης IrO₂, καθόδου Pt/C (Hispec 4000) και μεμβράνη Nafion® N115.

Οι δύο συστοιχίες παρασκευάστηκαν με την ίδια φόρτιση καταλύτη (1.0 mg/cm² και 0.4 mg/cm² για την άνοδο και κάθοδο, αντίστοιχα) και ακολουθώντας τις ίδιες αναλογίες στερεού (καταλύτη) και υγρών (νερό, ισοπροπανόλη, διάλυμα ιονομερούς Nafion) για την εναπόθεση των ηλεκτροδίων. Η μόνη διαφορά που παρουσιάζουν οι δύο συστοιχίες είναι η χρήση διαφορετικού πάχους μεμβράνης, με την N212 να διαθέτει μικρότερο πάχος από την N115, 50.8 μm και 127 μm αντίστοιχως. Η εναπόθεση των καταλυτών πραγματοποιήθηκε με την τεχνική του ψεκασμού (spraying) σε θερμαινόμενη πλάκα.

Η απόδοση των συστοιχιών για την ηλεκτρόλυση του νερού προς παραγωγή υδρογόνου και οξυγόνου μετρήθηκε μέσω καμπυλών ρεύματος-δυναμικού σε σταθερή κατάσταση, σε δύο διαφορετικές θερμοκρασίες, 80°C και 90°C. Με τη χρήση της φασματοσκοπίας ηλεκτροχημικής εμπέδησης προσδιορίστηκαν οι τιμές της ωμικής αντίστασης και της αντίστασης πόλωσης.

Παρατηρήθηκε σταδιακή αύξηση της απόδοσης των συστοιχιών κατά τη λειτουργία τους υπό συνθήκες ηλεκτρόλυσης, γεγονός που αποδίδεται κυρίως στην ενυδάτωση της μεμβράνης, οδηγώντας και σε μειωμένες τιμές ωμικής αντίστασης ως αποτέλεσμα της αύξησης της πρωτονιακής αγωγιμότητας. Η απόδοση έφτασε στην βέλτιστη τιμή της μετά από 3-4 ημέρες λειτουργίας, ενώ στο διάστημα που ελήφθησαν οι μετρήσεις δεν παρατηρήθηκε σημαντική υποβάθμιση, γεγονός που υποδεικνύει την αντοχή των συστοιχιών στο χρόνο.

Η διάταξη που διέθετε τη μεμβράνη N212 επέδειξε μεγαλύτερη απόδοση από την διάταξη που διέθετε τη μεμβράνη N115, γεγονός που οφείλεται στη μεγαλύτερη αγωγιμότητα της πρώτης λόγω μικρότερου πάχους.

Η παρούσα πτυχιακή εργασία εκπονήθηκε στο Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών και Ενεργειακών Πόρων (ΙΔΕΠ), του Εθνικού Κέντρου Έρευνας & Τεχνολογικής Ανάπτυξης (ΕΚΕΤΑ) Θεσσαλονίκης.

Μοριακά Υποστυλωμένο Γραφένιο με Ομάδες Πρόσδεσης Διθιολενίων και ΔιαμινώνΑιμιλία Παπασούλη¹, Ραφαήλ Λίγγας¹, Εμμανουήλ Κλώντζας², Εμμανουήλ Ν. Κουκάρας¹¹Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 55124, Θεσσαλονίκη.²Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Βασ. Κωνσταντίνου 48, 11635, Αθήνα.aimipapa@chem.auth.gr, rafaling@chem.auth.gr, klontzas@eie.gr, koukarase@chem.auth.gr

Περίληψη

Το μοριακά υποστυλωμένο γραφένιο είναι υλικό που αποτελείται από διαδοχικά φύλλα γραφενίου ή οξειδίου του γραφενίου διασυνδεδεμένα μεταξύ τους με οργανικά μόρια, που καλούνται μοριακά υποστυλώματα, μέσω διαφόρων μονάδων πρόσδεσης. Οι συνδυασμοί οργανικών πυλώνων και μονάδων πρόσδεσης οδηγούν σε πολλές δυνατότητες παραμετροποίησης και διαμόρφωσης ιδιοτήτων.

Με τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων στα πλαίσια της θεωρίας συναρτησιακού ηλεκτρονιακής πυκνότητας και της θεωρίας ισχυρής δέσμευσης, μελετάμε υπολογιστικά, συστήματα μοριακά υποστυλωμένου γραφενίου. Ως πυλώνα χρησιμοποιούμε το βενζολικό δακτύλιο, ο οποίος συνδέεται με τα φύλλα μέσω λειτουργικών ομάδων, όπως αμίνης ή θειόλης.

Αρχικά βελτιστοποιήθηκε η γεωμετρία των μοριακών υποστυλωμάτων με μοντέλο συσσωματώματος με κορονένια. Στη συνέχεια βελτιστοποιήθηκε η κυψέλη με τη μέθοδο GFN1-xTB [1] με χρήση περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Μελετήθηκε η μεταβολή της πυκνότητας καταστάσεων (density of states, DOS) ως συνάρτηση εφελκυστικής παραμόρφωσης του υλικού (strain) για εύρος παραμορφώσεων, από 0.1% – 2%. Οι υπολογισμοί εκτελέστηκαν με τη χρήση των λογισμικών Gaussian [2], xTB [3], CP2K [4] και Quantum Espresso. [5]

Οι περιπτώσεις που μελετήθηκαν για την διαμίνηση ήταν, σύνδεση της αμίνης α) με τους άνθρακες του γραφενίου, β) πλησίον εποξειδίων του γραφενίου και γ) η σύνδεση με καρβονύλια του γραφενίου. Αντίστοιχα, για τη διθειόλη μελετήθηκε η σύνδεση της θειόλης α) με εποξείδια του γραφενίου, και β) με άνθρακες πλησίον εποξειδίων.

Ευχαριστίες: Το έργο χρηματοδοτείται (ή χρηματοδοτήθηκε) από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛΙΔΕΚ) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ), με αρ. Σύμβασης Έργου 1536. Οι συγγραφείς θα ήθελαν να ευχαριστήσουν το Κέντρο Ηλεκτρονικής Διακυβέρνησης του Α.Π.Θ., για την υποστήριξη κατά τη διάρκεια αυτής της ερευνητικής εργασίας.

Βιβλιογραφία

- Grimme, S; et al., P. Journal of Chemical Theory and Computation, 13, 1989 (2017)
 Gaussian, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel et al., Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2016)
 C. Bannwarth, S. Grimme, et al., WIREs Comput. Mol. Sci., e01493(2020)
 Thomas D. K. et al., J. Chem. Phys. 152, 194103 (2020)
 P. Giannozzi, et al., J.Phys.:Condens.Matter 21, 395502 (2009)



Το έργο χρηματοδοτείται από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛΙΔΕΚ) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ), με αρ. Σύμβασης Έργου 1536.

Θεωρητική Μελέτη της Επίδρασης Επιφανειακής Αδρανοποίησης και Προσθήκης Οργανικών Λειτουργικών Ομάδων σε Αμιγή Συστήματα Κβαντικών Τελειών Πυριτίου και Γερμανίου

Γεώργιος Εμμανουηλίδης, Εμμανουήλ Ν. Κουκάρας

Εργαστήριο Κβαντικής και Υπολογιστικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 55124. egeorgios@chem.auth.gr, koukarase@chem.auth.gr.

Περίληψη

Οι κβαντικές τελείες (Quantum Dots, QDs) είναι ημιαγωγιμοί νανοκρύσταλλοι με μέγεθος 2–10 nm. Ένα επιστημονικά και τεχνολογικά χρήσιμο χαρακτηριστικό τους είναι η δυνατότητα ρύθμισης του ενεργειακού χάσματος από α) τις διαστάσεις της κβαντικής τελείας¹, β) την μορφή της επιφανειακής αδρανοποίησης ή επαναδόμησης², και γ) από την προσάρτηση επιφανειακών οργανικών λειτουργικών μονάδων³.

Οι κβαντικές τελείες Πυριτίου και Γερμανίου έχουν ιδιαίτερες φωτοχημικές και ηλεκτρικές ιδιότητες χρήσιμες για εφαρμογές. Σε σχέση με κλασικά χρησιμοποιούμενες οργανικές χρωστικές και φθορίζουσες πρωτεΐνες είναι πιο σταθερές, έχουν εντονότερη φωταύγεια και μεγαλύτερη ποικιλομορφία, μικρή τοξικότητα για τον ανθρώπινο οργανισμό και μπορούν να ακτινοβολήσουν σε μεγάλο εύρος του ορατού φάσματος⁴ ενώ έχουν μικρό κόστος παραγωγής τους. Αξιοσημείωτη είναι η προοπτική για χρήση των QDs στην βιοαπεικόνιση, στοχευμένη μεταφορά ουσιών και φαρμάκων σε κύτταρα καθώς και στην έρευνα διεργασιών στον βιολογικό μικρόκοσμο⁵.

Με τη χρήση υπολογιστικών μεθόδων στα πλαίσια της χρονοανεξάρτητης και χρονοεξαρτώμενης θεωρίας συναρτησιακού ηλεκτρονικού πυκνότητας μελετήσαμε α) αμιγείς νανοκρυστάλλους πυριτίου⁶, με επιφανειακή επικάλυψη υδρογόνου⁷ και στην συνέχεια με την επιλεκτική αντικατάσταση ατόμων υδρογόνου με άτομα οξυγόνου⁸, αζώτου, χλωρίου και με οργανικές λειτουργικές μονάδες⁹ β) αμιγείς νανοκρυστάλλους γερμανίου και με διάφορους τρόπους επιφανειακής αδρανοποίησης οι οποίοι ακολουθούν την ίδια μεθοδολογία εργασίας με τα συστήματα πυριτίου⁴. Διερευνήθηκε η εξάρτηση του ενεργειακού και οπτικού χάσματος των κβαντικών τελειών σε σχέση με τις διαστάσεις τους και σε σχέση με την εκδήλωση κβαντικού περιορισμού¹. Για επιλεγμένες δομές υπολογίσαμε φάσμα οπτικής και υπεριώδους απορρόφησης. Για τους υπολογισμούς χρησιμοποιήσαμε το υβριδικό συναρτησιακό B3LYP⁷ με το σύνολο βάσης SVP⁷. Όλοι οι υπολογισμοί εκτελέστηκαν με το λογισμικό πακέτο Gaussian⁷.

Ευχαριστίες

Μέρος των αποτελεσμάτων υπολογίστηκαν αξιοποιώντας την Υπολογιστική Συστοιχία και τις υπηρεσίες υποστήριξης του Κέντρου Ηλεκτρονικής Διακυβέρνησης του Α.Π.Θ.

Βιβλιογραφία

1. Gabay, D. *et al. Comp. Phys. Comm.* **221**, 95–101 (2017); Niaz, Shanawer *et al. Microelectronic Engineering* **112**, 231–234 (2013); Bostedt, C. *et al., Appl. Phys. Lett.* **84**, 4056 (2004).
2. Anas, M. M. *et al. J. Nanomat.* 481087 (2015); Nishio, K. *et al. Physical Review B*, **67** (2003).
3. Li, Q. *et al. ACS Nano*, **10**, 8385–8393 (2016); Zhou, *et al. Materials Today*, **20**, 360–376 (2017); Zdetsis, *et al. Microel. Eng.* **112**, 227–230 (2013); Lu, Qiujuan *et al.*, **36**, 12375–12382 (2020)
4. Melnikov *et al. Sol. St. Comm.* **127**, 365 (2003); Garoufalos, *et al. Phys. Rev.Lett.*, **87**, 276402 (2001).
5. Zhong *et al. Nano*, **9**, 5958 (2015); Cotta, M. A. *Appl. Nano Mat.* **3**, 4920 (2020); Chinnathambi *et al. Adv. Health. Mat.* **3**, 10 (2013); Tu, Chuqiao *et al. Med. Chem. Lett.* **2**, 285 (2011).
6. Jahangir, Mohammed Asadullah *et al. Pharmaceutical Nanotechnology*, **7** (2019); Gorshkov, Kirill *et al. ACS Nano*, **14**, 12234–12247 (2020); Yao, J. *et al. Acta Biomaterialia*, **74**, 36–55 (2018); Bailey, R. E. *et al.*, **25**, 1–12 (2004); Ding, C. *et al. Accounts of Chemical Research*, **47**, 20–30 (2013).
7. A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **98** (1993) 5648–52; C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, *Phys. Rev. B* **37**, 785–789 (1988); A. Schaefer, H. Horn, and R. Ahlrichs, *J. Chem. Phys.* **97**, 2571–77 (1992); Gaussian, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel *et al.*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, (2016).

Προσδιορισμός του σχήματος και του μεγέθους μικκυλίων SDS σε υδατικά διαλύματα αλάτων με μετρήσεις ιζώδους

Μπουρμπούλιας Α., Αβρανάς Α.

*Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 55124, Θεσσαλονίκη.*
email: sakisbsakisb@gmail.comavranas@chem.auth.gr

Στην εργασία αυτή μετράται το ιζώδες μιας σειράς διαλυμάτων του δωδεκυλοθειικού νατρίου (SDS) παρουσία αλάτων, σε διάφορες θερμοκρασίες. Οι συγκεντρώσεις του SDS είναι πάνω από την κρίσιμη συγκέντρωση σχηματισμού μικκυλίων (cmc). Έγινε μελέτη του σχήματος και του μεγέθους των μικκυλίων SDS σε υδατικά διαλύματα των αλάτων: NaCl, NaNO₃, NH₄Cl, NH₄NO₃, Na₂SO₄ και Na₂HPO₄ σε διάφορες συγκεντρώσεις. Είναι γνωστό βιβλιογραφικά ότι όταν γίνει προσθήκη μεγάλων ποσοτήτων αλάτων σε υδατικά διαλύματα ιονικών τασενεργών, όπως το SDS, τα σχηματιζόμενα μικκύλια της τασενεργής ουσίας μετατρέπονται από σφαιρικά σε ραβδοειδή. Μία συνέπεια αυτής της μετατροπής είναι και η μεγάλη αύξηση του ιζώδους. Μέσω του νόμου του Einstein για το ιζώδες κολλοειδούς διασποράς και της εξίσωσης του Simha έγινε προσδιορισμός του λόγου των δύο αξόνων των ραβδοειδών μικκυλίων, και στη συνέχεια του αριθμού συσσωμάτωσης και του όγκου τους. Παρατηρήθηκε ότι το μέγεθος των ραβδοειδών μικκυλίων, το οποίο μπορεί να είναι και 100 φορές μεγαλύτερο σε σχέση με των σφαιρικών, ελαττώνεται σε σχέση με το προστιθέμενο άλας με την εξής σειρά: NH₄Cl > NH₄NO₃ > Na₂SO₄ ≈ Na₂HPO₄ > NaCl > NaNO₃. Επιπλέον, διαπιστώθηκε ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας το μέγεθος των μικκυλίων μειώνεται, με τα μικκύλια να τείνουν να γίνουν σφαιρικά σε πολύ υψηλές θερμοκρασίες > 60°C. Χαρακτηριστικό είναι το γεγονός ότι το μέγεθος των μικκυλίων μειώνεται κατά 30 – 50% περίπου με αύξηση της θερμοκρασίας κατά 10°C. Τέλος, παρατηρήθηκε και η αύξηση του μεγέθους των μικκυλίων με την αύξηση της συγκέντρωσης του SDS για σταθερή συγκέντρωση προστιθέμενου άλατος.

Τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν στο Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, του Τμήματος Χημείας, της Σχολής Θετικών Επιστημών, του Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης.

Επίδραση των Στρατοσφαιρικών Συνθηκών στη Διάχυση των Φθοροχλωρανθράκων στον Αέρα

N. Ιακωβάκης, Κ. Μαρτακίδης, Δ. Γαβριήλ

Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας,

Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη.

email:niakovak@chem.auth.gr <https://orcid.org/0000-0002-4560-839X>

kmartaki@chem.auth.gr <https://orcid.org/0000-0003-2260-932X>

dgavriil@chem.auth.gr <https://orcid.org/0000-0002-0932-7283>

Περίληψη

Οι φθοροχλωράνθρακες (CFCs) υπήρξαν ευρέως χρησιμοποιούμενα ψυκτικά μέσα. Μερικά από αυτά, π.χ. διφθοροδιχλωρομεθάνιο (CFC-12), έχουν δυσμενείς επιπτώσεις στην προστατευτική στιβάδα του στρατοσφαιρικού όζοντος. Η κύρια οδός μεταφοράς CFCs από χαμηλότερα προς υψηλότερα ατμοσφαιρικά στρώματα είναι η διάχυση στην αέρια φάση. Περαιτέρω κατανόηση των διαμοριακών δυνάμεων: μέγιστα δυναμικής ενέργειας και διάμετροι σύγκρουσης, που δρουν σε δυαδικά συστήματα CFCs με αέρια της ατμόσφαιρας μπορεί να επιτευχθεί με ακριβείς συντελεστές διάχυσης στην αέρια φάση, χρήσιμοι στην αναζήτηση εναλλακτικών ψυκτικών, καθώς και για μοντελοποίηση και προσομοίωση της δραστηριότητάς τους στη στρατόσφαιρα. Ο κύριος στόχος αυτής της εργασίας είναι να διερευνήσει τις επιπτώσεις των ατμοσφαιρικών συνθηκών στη μεταφορά CFCs από την επιφάνεια της Γης στη στρατόσφαιρα μελετώντας τις επιπτώσεις του υψομέτρου, της πίεσης, της θερμοκρασίας και των εποχιακών μετεωρολογικών συνθηκών στους συντελεστές διάχυσης στην αέρια, στις παραμέτρους σύγκρουσης και στις τιμές της μέσης ελεύθερης διαδρομής. Χρησιμοποιούνται πρόσφατα ακριβή ατμοσφαιρικά δεδομένα που ελήφθησαν από τη NASA, σχετικά με τις στρατοσφαιρικές συνθήκες στο νότιο ημισφαίριο. Στην παρούσα εργασία, χρησιμοποιούνται συντελεστές διάχυσης διαφόρων CFCs στον αέρα, που προσδιορίζονται πειραματικά μέσω χρωματογραφίας αερίου διασποράς Taylor, σε ευρεία κλίμακα θερμοκρασίας 273,2-453,2 K, για την εκτίμηση των διαμέτρων διατομής σύγκρουσης και στη συνέχεια των μέσων τιμών ελεύθερης διαδρομής υπό στρατοσφαιρικές συνθήκες. Τα ενδεικτικά ευρήματα που σχετίζονται με το δυαδικό σύστημα CFC-12 στον αέρα, δείχνουν ότι οι τιμές των συντελεστών διάχυσης στην αέρια φάση αυξάνονται από 200 σε 25000 φορές σε σχέση με τις τιμές στην επιφάνεια της Γης και ανάλογα με την εξίσωση που χρησιμοποιείται. Η ποσοστιαία μεταβολή στις τιμές μέσης ελεύθερης διαδρομής έδειξε ότι αυξάνονται ~ 50-200 φορές στο εύρος υψόμετρου που μελετάμε. Οι επιπτώσεις του υψόμετρου και της θερμοκρασίας στους συντελεστές διάχυσης και στις παραμέτρους σύγκρουσης παρουσιάζονται σε πίνακες και τρισδιάστατα διαγράμματα.

Λέξεις-κλειδιά

CFC-11, CFC-12, CFC-113, CFC-114, CFC-115, CFC-123, CFC-124, CFC-134a, HFC-32, HCFC-22, Αέρας, Συντελεστής Διάχυσης, Διάμετρος Σύγκρουσης, Στρατόσφαιρα, Υψόμετρο, Θερμοκρασία, Πίεση

Ανάπτυξη και επικύρωση αναλυτικής μεθόδου για τον προσδιορισμό της γενετοξικής πρόσμιξης, υδραζίνη, σε φαρμακευτικά σκευάσματα αλλοπουρινόλης με UHPLC-FLD

Χριστοφή Μ.^{1,2}, Μαρκοπούλου Α.¹, Τζαναβάρας Π.³, Ζαχαρής Κ.¹

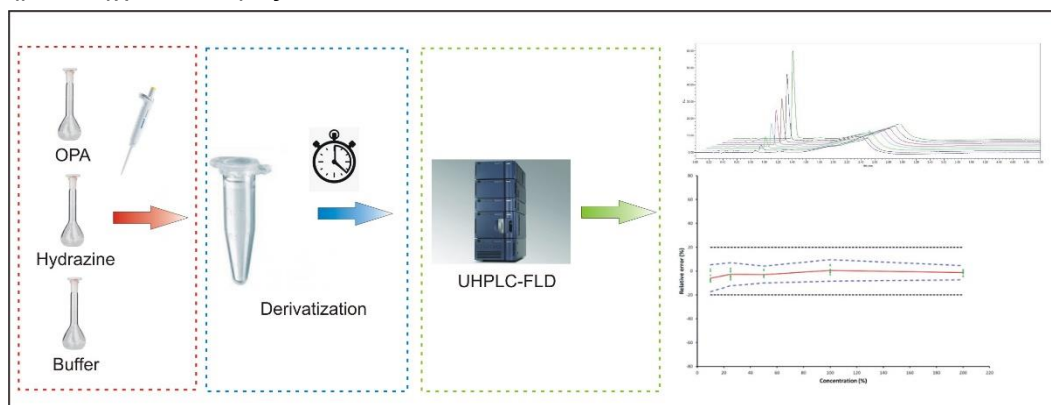
¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη

²Εργαστήριο Έρευνας και Ανάπτυξης, Remedica, Βιομηχανική Περιοχή Λεμεσού, 3056 Λεμεσός, Κύπρος

³Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη

e-mail: christofi9@hotmail.com, czacharis@pharm.auth.gr

Η παρούσα μελέτη εστιάζεται στην ανάπτυξη και επικύρωση μιας νέας αναλυτικής μεθόδου για την ποσοτικοποίηση υπολειμμάτων της γενετοξικής πρόσμιξης – υδραζίνη – σε φαρμακευτικά σκευάσματα αλλοπουρινόλης, με χρήση της χρωματογραφίας υγρού υπερευψηλής απόδοσης με ανιχνευτή φθορισμού. Η υδραζίνη παραγωγοποιήθηκε πριν την είσοδο της στη στήλη μέσω μιας ξεχωριστής χημείας, με ορθο – φθαλαλδεΐδη σε όξινες συνθήκες. Το παράγωγο παρουσιάζει έντονο φθορισμό σε όξινες συνθήκες, κατάλληλο για ανίχνευση και ποσοτικοποίηση. Οι παράγοντες που επηρεάζουν την αντίδραση παραγωγοποίησης, καθώς και οι χρωματογραφικές παράμετροι μελετήθηκαν διεξοδικά. Η επικύρωση της μεθόδου πραγματοποιήθηκε σε εύρος από 10 έως 200% του ορίου συγκέντρωσης «στόχου» της προσδιοριζόμενης ένωσης, με τη χρήση των «προφίλ ακριβείας» (accuracy profiles). Τα αναμενόμενα διαστήματα ανοχής, β, δεν υπερέβησαν τα κριτήρια αποδοχής ± 20 , γεγονός που εγγυάται ότι το 95% των μελλοντικών αποτελεσμάτων θα βρίσκονται εντός των καθορισμένων ορίων μεροληψίας (bias). Το εύρος των σχετικών σφαλμάτων κυμάνθηκε μεταξύ 6,0 και 0,5% και οι τιμές της σχετικής τυπικής απόκλισης για την επαναληψιμότητα και την ενδιάμεση πιστότητα ήταν χαμηλότερες από 6,9% σε όλες τις συγκεντρώσεις. Το όριο ανίχνευσης (LOD) και το κατώτερο όριο ποσοτικοποίησης (LLOQ) ήταν επαρκή για τον συγκεκριμένο σκοπό και βρέθηκαν να είναι 0,3 ng/mL (που αντιστοιχούν σε 0,03 μg/g) και 0,25 μg/g, αντίστοιχα. Η ανθεκτικότητα της μεθόδου, ελέγχθηκε με πειραματικό σχεδιασμό τόσο για τις χρωματογραφικές συνθήκες, όσο και για τη διαδικασία παραγωγοποίησης. Τέλος, η επικυρωμένη μέθοδος εφαρμόστηκε επιτυχώς στην ανάλυση παρτίδων και δισκίων της δραστικής φαρμακευτικής ουσίας αλλοπουρινόλης, υποδεικνύοντας ότι η εν λόγω μεθοδολογία μπορεί να υιοθετηθεί από τα εργαστήρια ελέγχου ποιότητας.



Χρήση απλών οργανικών ενώσεων στη μελέτη διαπερατότητας φαρμάκων για ενδοκολπική χορήγηση**Τσανακσίδου Ε.^{1,*}, Καραβασίλη Χ.², Ζαχαρής Κ.¹, Φατούρος Δ.², Μαρκοπούλου Α.¹**¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη²Εργαστήριο Φαρμακευτικής Τεχνολογίας, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη***e-mail:** etsanaktsi@pharm.auth.gr

Μία από τις μεγαλύτερες προκλήσεις της σύγχρονης φαρμακευτικής έρευνας είναι η ανάπτυξη μοντέλων τα οποία είναι ικανά να προβλέψουν την συμπεριφορά των υποψηφίων ενδοκολπικά χορηγούμενων φαρμάκων είτε με τοπική είτε με συστηματική δράση. Η ανάπτυξη τέτοιων μοντέλων είναι απαραίτητη ώστε να αποφευχθεί μεγάλος όγκος χρονοβόρων και κοστοβόρων φαρμακοκινητικών πειραμάτων. Αντικείμενο της παρούσας μελέτης αποτελεί η ανάπτυξη ενός πολυπαραγοντικού μοντέλου με στόχο τη μελέτη διαπερατότητας οργανικών ενώσεων με απλή δομή (υποκατεστημένα βενζόλια και ναφθαλένια) υπό συνθήκες που θα προσομοιάζουν τον κόλπο της μήτρας. Η διαπερατότητα είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με τα δομικά χαρακτηριστικά αλλά και τις φυσικοχημικές ιδιότητες των ενώσεων, έτσι, το μοντέλο πρόβλεψης που προτείνεται στην παρούσα εργασία συμπεριλαμβάνει πληθώρα ιδιοτήτων με στόχο στην συσχέτισή τους με την πειραματικά μετρούμενη διαπερατότητα των ενώσεων.

Συνολικά, η παρούσα εργασία έχει ως στόχο τον συσχετισμό του φαινόμενου συντελεστή διαπερατότητας (apparent permeability coefficient – P_{app}) από 26 απλές δομικά ενώσεις με τις ιδιότητές τους (φυσικοχημικές και δομικές). Η διαπερατότητα των ενώσεων προσδιορίστηκε με *in vitro* πειράματα (κελιά Franz), οι συγκεντρώσεις προσδιορίστηκαν με HPLC – UV και τα αποτελέσματα καταγράφονται ως η μεταβλητή Y στο μοντέλο Μερικών Ελαχίστων Τετραγώνων (Partial Least Squares – PLS) που αναπτύχθηκε, ενώ 28 φαρμακοκινητικά και δομικά χαρακτηριστικά χρησιμοποιήθηκαν ως X παρατηρήσεις (descriptors). Το μοντέλο που αναπτύχθηκε υποβλήθηκε σε επικύρωση και φαίνεται να είναι εύρωστο (robust) και με καλή προβλεψιμότητα ($R^2Y = 0.812$, $Q^2Y = 0.579$). Βάσει των αποτελεσμάτων, συγκεκριμένες ιδιότητες όπως η επιφάνεια των ενώσεων (surface area), η ευκαμψία (molecular flexibility), αλλά και οι σταθερές $\log D_{5.5}$, $\log D_{7.4}$ και $\log P$ αποδείχθηκαν πιο σημαντικές από άλλες για την διαπερατότητα των ενώσεων. Το μοντέλο, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την πρόβλεψη της διαπερατότητας δομικά απλών ενώσεων με στόχο την εφαρμογή του σε φάρμακα που θα χορηγούνται ενδοκολπικά.

Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου HPLC-DAD για τον ταυτόχρονο ποσοτικό προσδιορισμό σουλφασαλαζίνης και οξικής υδροκορτιζόνης σε δισκία ελεγχόμενης αποδέσμευσης και ορθικά υπόθετα

Τσάμης Β.¹, Καραβασίλη Χ.², Φατούρος Δ.², Ζαχαρής Κ.¹, Μαρκοπούλου Α.¹

¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

²Εργαστήριο Φαρμακευτικής Τεχνολογίας, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

e-mail: vasilistsm@gmail.com, amarkopo@pharm.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η χρόνια φλεγμονώδης νόσος του εντέρου είναι μία ιδιοπαθής γαστρεντερολογική νόσος, από την οποία υπολογίζεται ότι πάσχουν περίπου 7 εκατομμύρια άτομα παγκοσμίως. Η εργασία αυτή περιγράφει τη διαδικασία ανάπτυξης και επικύρωσης αναλυτικής μεθόδου HPLC-DAD για τον ταυτόχρονο ποσοτικό προσδιορισμό σουλφασαλαζίνης και οξικής υδροκορτιζόνης, δύο θεραπευτικών ενώσεων που χρησιμοποιούνται στην κλινική πράξη για τη συμπτωματική θεραπεία της ελκώδους κολίτιδας, μίας μορφής της χρόνιας φλεγμονώδους νόσου του εντέρου. Η μέθοδος αναπτύχθηκε σε στατική φάση οκταδεκυλοσιλανίου, με κινητή φάση μεθανόλης/ρυθμιστικού διαλύματος φωσφορικών ιόντων και έχει ως στόχο την ποσοτικοποίηση των δύο ενώσεων σε εργαστηριακά παρασκευασθέντα δισκία ελεγχόμενης αποδέσμευσης και ορθικά υπόθετα, τα οποία περιέχουν συνδυασμό των θεραπευτικών μορίων σε προσαρμοσμένες δόσεις. Για την επίτευξη ικανοποιητικού χρόνου ανάλυσης, απαιτήθηκε η εφαρμογή προγράμματος βαθμιδωτής έκλουσης. Η επικύρωση της μεθόδου ως προς τις παραμέτρους της γραμμικότητας, της πιστότητας, της ακρίβειας, της εκλεκτικότητας και της ανθεκτικότητας, πραγματοποιήθηκε με βάση τις κατευθυντήριες γραμμές του ICH για την επικύρωση αναλυτικών μεθόδων. Στα πλαίσια της παρούσας εργασίας, επίσης, αναπτύχθηκε μία δεύτερη μέθοδος HPLC-DAD, με σκοπό τον ταυτόχρονο προσδιορισμό μεσαλαζίνης, σουλφασαλαζίνης και οξικής υδροκορτιζόνης. Ως στατική φάση χρησιμοποιήθηκε και σε αυτήν την περίπτωση στήλη οκταδεκυλοσιλανίου, με κινητή φάση αποτελούμενη από μεθανόλη και ρυθμιστικό διάλυμα φωσφορικών ιόντων, ενώ η έκλουση έλαβε χώρα με τη βοήθεια κατάλληλου προγράμματος βαθμιδωτής έκλουσης. Η μεσαλαζίνη είναι ο δραστικός μεταβολίτης της σουλφασαλαζίνης, ο οποίος παράγεται κατά το μεταβολισμό της σουλφασαλαζίνης στο εσωτερικό του παχέος εντέρου από αζωρεδουκτάσες της φυσιολογικής μικροχλωρίδας. Η μέθοδος αυτή προορίζεται για χρήση σε μελέτη της ex-vivo διαπερατότητας των τριών ενώσεων διαμέσου ζωϊκής εντερικής μεμβράνης.

Βελτιστοποίηση μεθόδου προσδιορισμού της ελεύθερης κορτιζόλης με LC-MS σε πλάσμα κίρρωτικών ασθενών

Τσάμη Μ., Κούσκουρα Μ., Μαρκοπούλου Α.

*Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, Σχολή Επιστημών Υγείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη*
e-mail: tsamimaria@gmail.com

Η κίρρωση του ήπατος αποτελεί μια παθολογική κατάσταση, η οποία ταλανίζει ένα μεγάλο ποσοστό ανθρώπων σήμερα. Σε πολλούς από τους πάσχοντες μπορεί κατά την εξέλιξη της νόσου να εμφανιστούν κίρσοι που συνοδεύονται από αιμορραγικά επεισόδια και μεταβολές στα επίπεδα διαφόρων ενζύμων, ενώσεων και ορμονών. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μεταβολή των επιπέδων της κορτιζόλης, μιας σημαντικής για τον οργανισμό ορμόνης που εμφανίζει πλειοτροπική δράση και μπορεί να βρίσκεται είτε με την ελεύθερη είτε με τη δεσμευμένη σε πρωτεΐνες του πλάσματος μορφή.

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι ο ποιοτικός και ποσοτικός προσδιορισμός της ελεύθερης κορτιζόλης σε δείγματα πλάσματος 44 ασθενών. Οι αναλύσεις στηρίζονται στη μέθοδο της υγρής χρωματογραφίας, αντίστροφης φάσης, συζευγμένης με φασματομετρία μαζών (ESI-Q LC-MS).

Για την προκατεργασία των δειγμάτων και των πρότυπων διαλυμάτων, εφαρμόστηκε η τεχνική εκχύλισης στερεάς φάσης (SPE). Το έκλουσμα μεταφέρθηκε στο χρωματογραφικό σύστημα, του οποίου οι συνθήκες περιλάμβαναν στήλη αντίστροφης φάσης (C18) και ισοκρατική έκλουση [50 ACN : 50 10% HCOOH(aq), ροή: 0,5mL/min]. Μετά τον διαχωρισμό, η ανάλυση πραγματοποιήθηκε με τη βοήθεια φασματομετρίας μάζας ηλεκτροψεκασμού με πηγή τετράπολο (ESI-Q), με τη μέθοδο προσθήκης αρνητικού ιόντος ($m/z=407$ για την κορτιζόλη και $m/z=447$ για την οξική πρεδνιζολόνη). Η οξική πρεδνιζολόνη χρησιμοποιήθηκε ως εσωτερικό πρότυπο.

Για την ανάπτυξη της μεθόδου, ετοιμάστηκαν τρεις σειρές προτύπων διαλυμάτων και αφού μετρήθηκαν στο LC-MS, κατασκευάστηκαν οι αντίστοιχες καμπύλες αναφοράς με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Η αναλυτική μέθοδος επέδειξε καλή γραμμικότητα σε συγκεντρώσεις από 10,8 έως 345,6 ng/mL. Ο συντελεστής συσχέτισης (r^2) ήταν μεγαλύτερος από 0,9981. Με βάση τα αποτελέσματα, αποδείχθηκε ότι η πρώτη καμπύλη αναφοράς μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εξαγωγή των τελικών συγκεντρώσεων.

Τέλος, αναφορικά με τη συγκέντρωση ελεύθερης κορτιζόλης στα δείγματα των ασθενών, παρατηρήθηκε μεγάλη διακύμανση, γεγονός που είναι αναμενόμενο αφού μπορεί να οφείλεται τόσο στη διαφορετική βαρύτητα κάθε περίπτωσης, όσο και στο διαφορετικό στάδιο που βρίσκονται ή/και είδος φαρμακευτικής αγωγής που λαμβάνουν.

Λέξεις-κλειδιά: κορτιζόλη, οξική πρεδνιζολόνη, πλάσμα αίματος, SPE, LC-MS

Καινοτόμα παιδιατρικά σκευάσματα αμοξικιλίνης – Ανάπτυξη & επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού της αμοξικιλίνης με τη χρήση HPLC

Κίκα Α.¹, Ντερέκα Σ.¹, Συναρίδου Μ.¹, Ζαχαρής Κ.¹, Μαρκοπούλου Α.¹

¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

e-mail: athinakika.27@gmail.com, serafina.nt@hotmail.com, msynarid@hotmail.com, czacharis@pharm.auth.gr, amarkopo@pharm.auth.gr

Η γεύση είναι ίσως ο κυριότερος παράγοντας για τις από του στόματος δοσολογικές μορφές που καθορίζει την συμμόρφωση των ασθενών, ιδιαιτέρως των παιδιών. Γι' αυτό το λόγο η επικάλυψη των φαρμάκων (taste masking) κυρίως με γλυκαντικές ουσίες συνεχίζει να αποτελεί έναν από τους τομείς διερεύνησης της σύγχρονης τεχνολογίας. Η αμοξικιλίνη αποτελεί ένα από τα πιο ευρέως συνταγογραφούμενα αντιβιοτικά για την θεραπεία βακτηριακών λοιμώξεων, όμως η δυσάρεστη γεύση της δυσχεραίνει την χορήγησή της σε παιδιά. Στην παρούσα εργασία παρασκευάστηκαν καινοτόμα μασώμενα σκευάσματα αμοξικιλίνης που απευθύνονται στους «μικρούς» ασθενείς στα οποία η πικρή γεύση της δραστηκής έχει επικαλυφθεί. Το άμυλο αραβοσίτου (παιδική τροφή) και η σοκολάτα γάλακτος χρησιμοποιήθηκαν ως έκδοχα.

Ο ποιοτικός και ποσοτικός προσδιορισμός της αμοξικιλίνης αποτέλεσε μια πρόκληση λόγω της πολυπλοκότητας του υποστρώματος (επικάλυψη σοκολάτας). Για την εκχύλιση της δραστηκής ουσίας από το σκεύασμα χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της υγρής εκχύλισης ενώ για τον ποσοτικό προσδιορισμό της αμοξικιλίνης αναπτύχθηκε χρωματογραφική μέθοδος με χρήση Υγρής Χρωματογραφίας Υψηλής Απόδοσης (HPLC). Ως στατική φάση χρησιμοποιήθηκε στήλη C18 και ως κινητή φάση μείγμα ρυθμιστικού διαλύματος φωσφορικών pH3 – ακετονιτριλίου (95:5%v/v). Η μέθοδος βελτιστοποιήθηκε και επικυρώθηκε σύμφωνα με τις κατευθυντήριες οδηγίες του ICH. Συγκεκριμένα οι παράμετροι που μελετήθηκαν ήταν η γραμμικότητα, η πιστότητα (επαναληψιμότητα & αναπαραγωγιμότητα), η ακρίβεια και η ειδικότητα και βρέθηκαν εντός των αποδεκτών ορίων.

Τέλος, μελετήθηκαν οι φυσικοχημικές ιδιότητες των δισκίων (έλεγχος σκληρότητας- hardness, ευθρυπτότητας - friability και αποσάθρωσης – disintegration) σύμφωνα με τις οδηγίες της Ευρωπαϊκής Φαρμακοποιίας καθώς επίσης και ο ρυθμός απελευθέρωσης του φαρμάκου/ διαλυτοποίησης (dissolution test) από το σκεύασμα. Η σταθερότητα των νέων φαρμακοτεχνικών μορφών ελέγχθηκε για χρονικό διάστημα ενός έτους και οι ανακτήσεις κυμάνθηκαν σε αποδεκτά επίπεδα (%R>97%).

Προσδιορισμός και παρουσία οργανοφωσφορικών εστέρων σε δείγματα ξηρής απόθεσης στη Θεσσαλονίκη

Παντελάκη Ι., Διακουλάκη Σ., Βουτσά Δ.

Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη,
e-mail: ipantelaki@chem.auth.gr

Οι οργανοφωσφορικοί εστέρες (ΟΡΕs) είναι εστέρες φωσφορικού οξέος που χρησιμοποιούνται κυρίως ως πλαστικοποιητές, αλλά και ως πρόσθετα σε εύφλεκτα υλικά για την πρόληψη πυρκαγιάς. Αποτελούν τους αντικαταστάτες των τοξικών βρωμιωμένων επιβραδυντικών φλόγας, με αποτέλεσμα να αυξάνεται συνεχώς η παραγωγή τους. Η ευρεία χρήση τους σε συνδυασμό με την εύκολη απελευθέρωσή τους από τα υλικά δημιουργούν ανησυχία σχετικά με την περιβαλλοντική τους τύχη και τις επιπτώσεις τους στην ανθρώπινη υγεία και το περιβάλλον.

Η μελέτη αυτή διερευνά την παρουσία των ΟΡΕs σε δείγματα ξηρής απόθεσης από τη Θεσσαλονίκη. Οι δειγματοληψίες πραγματοποιήθηκαν κατά την περίοδο 2020-2021. Επιλέχθηκαν τρεις κατηγορίες ενώσεων για παρακολούθηση: τα αλκυλο, αρυλο και χλωριωμένα παράγωγα. Η ανάκτησή τους έγινε με εκχύλιση υποβοηθούμενη από υπέρηχους και ο προσδιορισμός τους με GC-MS/MS. Τα αποτελέσματα αξιολογούνται ως προς την εποχιακή διακύμανση, καθώς και τις πιθανές πηγές των ΟΡΕs. Οι κυρίαρχες ενώσεις είναι tris (2-butoxyethyl) phosphate (TBOEP), tris(1,3-dichloro-2-propyl)phosphate (TDCPP) και tricresyl phosphate (TCP).

Ενώσεις αζώτου σε κολυμβητικές δεξαμενές

Δήμητρα Βουτσά, Βάια Φαντίδου

Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος Τμήματος Χημείας του Α.Π.Θ.

e-mail: dvoutsa@chem.auth.gr και vaiafa11@gmail.com

Η κολύμβηση σε κολυμβητικές δεξαμενές αποτελεί δημοφιλή επιλογή άσκησης καθ' όλη τη διάρκεια του χρόνου. Επιλέγεται για αναψυχή, καθώς και για σωματική άσκηση, ευεργετική για την ανθρώπινη υγεία. Για να διατηρηθούν οι θετικές πτυχές αυτής της δραστηριότητας, πρέπει να δοθεί προσοχή στην υγιεινή και στην χημική ποιότητα του νερού. Ο στόχος αυτής της μελέτης είναι να διερευνήσει την ύπαρξη ανόργανων ενώσεων αζώτου στο νερό των κολυμβητικών δεξαμενών. Τα δείγματα νερού συλλέχθηκαν από διάφορες κολυμβητικές δεξαμενές (εσωτερικές, εξωτερικές, για παιδιά, ενήλικες) στην περιοχή της Θεσσαλονίκης κατά τη διάρκεια τριών περιόδων δειγματοληψίας. Τα δείγματα αναλύθηκαν για νιτρώδη, νιτρικά και αμμωνία. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό των ιόντων ήταν η χρωματομετρική μέθοδος, η μέθοδος αναγωγής καδμίου και η μέθοδος της φαινόλης αντίστοιχα. Επιπλέον συλλέχθηκαν και αναλύθηκαν δείγματα νερού από ορισμένες εγκαταστάσεις τροφοδοσίας, των οποίων οι μετρήσεις συγκρίθηκαν με τις αντίστοιχες των δειγμάτων από κολυμβητικές δεξαμενές.

Προσδιορισμός μικροπλαστικών σε αμμώδεις παραλίες στην ευρύτερη παράκτια περιοχή της Θεσσαλονίκης

Καλαρώνης Δ.1, Αϊναλή Ν.Μ.^{1,2}, Κοντογιάννης Α.1, Ευγενίδου Ε.1, Μπικιάρης Δ.Ν.²
και Λαμπροπούλου Δ.^{1,3}

¹Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης,

²Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης,

³Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ) Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης

e-mail: dimitriskalarwnhs@gmail.com, ainali.nina@gmail.com,
antoniskontogiannis29@gmail.com, evgenido@chem.auth.gr, dbic@chem.auth.gr,
dlambro@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ρύπανση των μικροπλαστικών (microplastics – MPs; πολυμερικά θραύσματα με μέγεθος < 5 μm) στο θαλάσσιο περιβάλλον έχει αναδειχθεί τα τελευταία χρόνια ως ένα από τα σημαντικότερα περιβαλλοντικά προβλήματα λόγω της εκτενούς χρήσης των πλαστικών και των αρνητικών οικολογικών και βιολογικών επιπτώσεών τους. Ως εκ τούτου, σκοπός της παρούσας εργασίας ήταν η κατανομή, η αφθονία, το είδος και τα μορφολογικά χαρακτηριστικά (μέγεθος, σχήμα, χρώμα) των μικροπλαστικών σε αμμώδεις παραλίες στην ευρύτερη παράκτια περιοχή της Θεσσαλονίκης. Τα δείγματα κατά την διάρκεια της προκατεργασίας χωρίστηκαν σε δύο βασικές κατηγορίες. Στα δείγματα με μέγεθος ≥ 500 μm και σε αυτά των < 500 μm. Στην πρώτη κατηγορία ακολουθήθηκε η απευθείας απομόνωση των πιθανών μικροπλαστικών από τα δείγματα με τη χρήση στερεοσκοπικού μικροσκοπίου και κάμερας υψηλής ανάλυσης. Στη δεύτερη περίπτωση ακολουθήθηκε ο διαχωρισμός πυκνότητας με προσθήκη υπερκορεσμένου $ZnCl_2$ (1.8 g/ml). Το δείγμα υποβλήθηκε σε διαδικασία διήθησης με τη βοήθεια κατάλληλων φίλτρων υαλοϊνών (glass fiber filters, διάμετρος πόρων=1.6 μm). Μετέπειτα, ακολουθήθηκε η διαδικασία ξήρανσης σε θερμοκρασία περιβάλλοντος και η διαδικασία πέψης με χρήση διεργασιών οξειδωσης (30% H_2O_2 + Fe_2SO_4 0,02 M) με σκοπό την απομάκρυνση οργανικής ύλης από το μείγμα. Η ταυτοποίηση των μικροπλαστικών πραγματοποιήθηκε με τη χρήση Φασματοσκοπίας Υπέρυθρου Μετασχηματισμού Fourier (FTIR) και Πυρόλυσης – Αέριας Χρωματογραφίας Φασματομετρίας Μάζας (Py-GC/MS). Τα αποτελέσματα επιβεβαίωσαν την ύπαρξη των μικροπλαστικών που κατά κύριο λόγο αποτελούνταν από θραύσματα πολυαιθυλενίου και πολυαμιδικές ίνες.

Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φαρμακευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση υγρής χρωματογραφίας-φασματομετρίας μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας

Αναγνωστοπούλου Κυριακή^{1,2}, Νάννου Χριστίνα^{1,2}, Λαμπροπούλου Δήμητρα^{1,2}

¹Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη

²Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ) Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης

e-mail: dlambro@chem.auth.gr

Η παρουσία μικρορύπων ανθρωπογενούς προέλευσης σε επιφανειακά ύδατα, όπως οι φαρμακευτικές ενώσεις, έχει αναγνωριστεί τα τελευταία χρόνια ως ένα από τα σημαντικότερα περιβαλλοντικά ζητήματα υποβάθμισης της ποιότητας του υδάτινου περιβάλλοντος. Πρόκειται για αναδυόμενους ρύπους, οι οποίοι καταλήγουν στο περιβάλλον μέσω της απέκκρισης από τον άνθρωπο ή της απευθείας διάθεσης των ληγμένων ή αχρησιμοποίητων σκευασμάτων στις αποχετεύσεις ή στα οικιακά απορρίμματα. . Οι ενώσεις αυτές δεν αποικοδομούνται εύκολα και ούτε απομακρύνονται σε ικανοποιητικό βαθμό με τις παραδοσιακές μεθόδους που εφαρμόζονται στις εγκαταστάσεις επεξεργασίας λυμάτων (ΕΕΛ), με αποτέλεσμα η εκροή των ΕΕΛ να αποτελεί την κύρια οδό για την είσοδό τους στο υδάτινο οικοσύστημα. Οι ενώσεις αυτές υπόκεινται σε βιοτικές (αερόβιες-αναερόβιες αποικοδομήσεις από μικροοργανισμούς) και αβιοτικές διεργασίες (υδρόλυση, φωτόλυση κλπ.) μετά την είσοδό τους στο υδάτινο περιβάλλον, για αυτό και η μελέτη και ταυτοποίηση των προϊόντων μετασχηματισμού τους κρίνεται αναγκαία για την αξιολόγηση των αρνητικών επιπτώσεων τους στα υδάτινα οικοσυστήματα. Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν ο προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φαρμακευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα, με υγρή χρωματογραφία συζευγμένη με φασματομετρία μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας (Orbitrap LC-MS/MS). Για την προκατεργασία των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε η τεχνική της εκχύλισης δια της στερεάς φάσης (SPE). Για την «κατασκευή» της δυναμικής λίστας υπόπτων ενώσεων, λήφθηκαν υπόψη οι συχνά απαντώμενες αρχικές φαρμακευτικές ενώσεις στα επιφανειακά ύδατα, οι υψηλά καταναλισκόμενες φαρμακευτικές ουσίες, αλλά και τα διαθέσιμα βιβλιογραφικά δεδομένα για τα προϊόντα μετασχηματισμού φαρμακευτικών ενώσεων. Οι *a priori* πληροφορίες που εισήχθησαν στη βάση δεδομένων, ήταν ο μοριακός τύπος, η ακριβής μάζα του πρωτονιωμένου ή αποπρωτονιωμένου ψευδομοριακού ιόντος, η λειτουργία του ιοντισμού με ηλεκτροψεκασμό (θετικός/αρνητικός) και τα τυχόν διαθέσιμα από τη βιβλιογραφία ιόντα θραυσματοποίησης των υπόπτων ενώσεων. Τα κριτήρια για την ταυτοποίηση των υπόπτων ενώσεων ήταν η ένταση της κορυφής, το ισοτοπικό προφίλ και ο χρόνος κατακράτησης. Η επεξεργασία των αποτελεσμάτων οδήγησε στην πιθανή ταυτοποίηση περίπου 100 παραπροϊόντων φαρμακευτικών ενώσεων.

Προσδιορισμός προϊόντων μετασχηματισμού φυτοπροστατευτικών ενώσεων σε επιφανειακά ύδατα με τη χρήση υγρής χρωματογραφίας φασματομετρία μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας

Στυλιανή Πετρομελίδου^{1,2}, Χριστίνα Νάννου^{1,2}, Δήμητρα Λαμπροπούλου^{1,2}

¹Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

²Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ) Αριστοτελείου Πανεπιστημίου Θεσσαλονίκης

e-mail: dlambro@chem.auth.gr

Η εντατικοποίηση της γεωργικής παραγωγής κατά τις τελευταίες δεκαετίες έχει ως αποτέλεσμα τη ραγδαία αύξηση στη χρήση φυτοπροστατευτικών ενώσεων, οι οποίες μέσω διεργασιών όπως η επιφανειακή απορροή, η έκπλυση, η απρόσεκτη διάθεση των άδειων συσκευασιών, κ.ά καταλήγουν στο υδάτινο περιβάλλον. Εκεί, υπόκεινται σε βιοτικές και αβιοτικές διεργασίες, με αποτέλεσμα να μετασχηματίζονται σε προϊόντα που μπορεί να είναι ακόμα πιο τοξικά από τις μητρικές ενώσεις. Η παρουσία υπολειμμάτων φυτοπροστατευτικών ενώσεων ή/και προϊόντων μετασχηματισμού τους (TPs) στα επιφανειακά νερά σχετίζεται άμεσα με την ποιότητα των υδάτων. Καθώς ο προσδιορισμός των μητρικών ενώσεων στα υδατικά δείγματα έχει μελετηθεί εκτενώς, το επιστημονικό ενδιαφέρον στρέφεται στα TPs, των οποίων η περιβαλλοντική τύχη είναι υπό διερεύνηση και σε συνδυασμό με την παρουσία τους σε χαμηλές συγκεντρώσεις αλλά και την απουσία διαθέσιμων αναλυτικών προτύπων, η ταυτοποίηση και ο προσδιορισμός τους εμπεριέχει σημαντικές δυσκολίες και αποτελεί μια χρονοβόρα και λεπτομερή διαδικασία. Στόχος της παρούσας εργασίας ήταν η αξιοποίηση της υγρής χρωματογραφίας-φασματομετρίας μάζας υψηλής διακριτικής ικανότητας (LC-HRMS) για την ταυτοποίηση προϊόντων μετασχηματισμού (TPs), με την τεχνική της παρακολούθησης των «ύποπτων» ενώσεων (suspect screening). Συγκεκριμένα χρησιμοποιήθηκε ο αναλυτής Orbitrap, ενώ για την προκατεργασία των δειγμάτων η εκχύλιση στερεάς φάσης (SPE). Δημιουργήθηκε μία δυναμική λίστα ύποπτων ενώσεων, βάσει των φυτοπροστατευτικών ενώσεων που χρησιμοποιούνται συστηματικά και απαντώνται συχνά στα επιφανειακά ύδατα, σύμφωνα με την πρόσφατη βιβλιογραφία. Οι *a priori* πληροφορίες που εισήχθησαν στη βάση δεδομένων, ήταν ο μοριακός τύπος, η ακριβής μάζα του πρωτονιωμένου ή αποπρωτονιωμένου ψευδομοριακού ιόντος, η λειτουργία του ιοντισμού με ηλεκτροψεκασμό (θετικός/αρνητικός) και τα τυχόν διαθέσιμα από τη βιβλιογραφία ιόντα θραυσματοποίησης των υπόπτων ενώσεων. Τα κριτήρια για την ταυτοποίηση των υπόπτων ενώσεων ήταν ο χρόνος κατακράτησης που επιβεβαιώθηκε μετά την ομαδοποίηση των ενώσεων, η ένταση της κορυφής και το ισοτοπικό προφίλ των ενώσεων. Κατά την επεξεργασία ταυτοποιήθηκαν 40 προϊόντα μετασχηματισμού από 25 μητρικές φυτοπροστατευτικές ενώσεις. Τα συχνότερα απαντώμενα προϊόντα μετασχηματισμού που ανιχνεύθηκαν προήλθαν από τα φυτοφάρμακα prometryn, reproxsulam, pyrimethanil, tebuconazole, thiabendazole και imazalil. Συγκεκριμένα το TP του pyrimethanil με μοριακό βάρος 250 ταυτοποιήθηκε σε όλα τα δείγματα που μελετήθηκαν. Αυξημένη ήταν και η συχνότητα ανίχνευσης του TP του imazalil με μοριακό βάρος 256 που ανιχνεύθηκε στο 77% των δειγμάτων.

**Φωτοκαταλυτική διάσπαση της αντικαταθλιπτικής φαρμακευτικής ουσίας
«Βενλαφαζίνη» σε υδατικά διαλύματα με χρήση οργανομεταλλικού καταλύτη.
Μελέτη κινητικής και εκτίμηση τοξικότητας.**

Αικατερίνη Οικονόμου¹, Ελένη Ευγενίδου^{1,2}, Δήμητρα Λαμπροπούλου^{1,2}

¹ Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη,

² Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας & Καινοτομίας Α.Π.Θ., Θεσσαλονίκη

Στην παρούσα εργασία διερευνήθηκε η φωτοκαταλυτική διάσπαση της φαρμακευτικής ένωσης «Βενλαφαζίνη» παρουσία του οργανομεταλλικού καταλύτη (Metal Organic Framework- MOF) Basolite F300 ή αλλιώς FeBTC, του οποίου η χημική δομή εμπεριέχει σίδηρο. Αρχικά, εξετάστηκε η φωτολυτική αποικοδόμηση της επιλεγμένης ένωσης, όπου διαπιστώθηκε αμελητέα διάσπαση και στη συνέχεια, εξετάστηκε η φωτοκαταλυτική αποικοδόμηση της παρουσία του Basolite F300 και του TiO₂- P25 ως καταλύτη αναφοράς. Τα πειράματα έδειξαν, επίσης, πολύ μικρό ποσοστό διάσπασης της ένωσης παρουσία του οργανομεταλλικού καταλύτη Basolite F300. Συνεπώς, με στόχο την ενεργοποίηση του φωτο-καταλύτη και την επιτάχυνση της όλης διεργασίας, εξετάστηκε η προσθήκη δύο διαφορετικών οξειδωτικών αντιδραστηρίων (H₂O₂ και Na₂S₂O₈). Πειράματα διεξήχθησαν σε διαφορετικές συγκεντρώσεις με σκοπό την εύρεση και την επιλογή της βέλτιστης συγκέντρωσης. Κατά την προσθήκη του οξειδωτικού Na₂S₂O₈, η πλήρης αποικοδόμηση της Βενλαφαζίνης επιτεύχθηκε μέσα σε 20 λεπτά. Παράλληλα, διενεργήθηκαν ξεχωριστά πειράματα φωτόλυσης με τα δύο προστιθέμενα οξειδωτικά αντιδραστήρια σε ίδιες συγκεντρώσεις με τα αντίστοιχα πειράματα φωτοκατάλυσης, με σκοπό την εκτίμηση της συμβολής των οξειδωτικών ουσιών στην συνολική φωτοκαταλυτική διεργασία. Επιπλέον, εκτιμήθηκε η οικοτοξικότητα των πιο πιθανών προϊόντων μετασχηματισμού της μητρικής ένωσης χρησιμοποιώντας το λογισμικό ECOSAR. Τα αποτελέσματα αποδεικνύουν τον σχηματισμό προϊόντων με ελαφρώς μικρότερη τοξικότητα από την αρχική ένωση. Συμπερασματικά, αυτά τα αποτελέσματα συμβάλλουν στην εύρεση αποδοτικών τρόπων εξάλειψης των υπολειμμάτων του συγκεκριμένου ρύπου από τα νερά και τα υγρά απόβλητα.

Simultaneous removal of anti-inflammatory pharmaceutical compounds from an aqueous mixture with adsorption onto chitosan zwitterionic derivative

Neda Malesic-Eleftheriadou^{a,b}, Eleni Evgenidou^{a,b}, Maria Lazaridou^c, Dimitrios N. Bikiaris^c, Xin Yang^d, George Z. Kyzas^e, Dimitra A. Lambropoulou^{a,b*}

^aLaboratory of Environmental Pollution Control, Department of Chemistry, Aristotle University of Thessaloniki, GR-541 24 Thessaloniki, Greece

^bCenter for Interdisciplinary Research and Innovation (CIRI-AUTH), Balkan Center, Thessaloniki, GR-57001.

^cLaboratory of Polymer Chemistry and Technology, Department of Chemistry, Aristotle University of Thessaloniki, GR-541 24 Thessaloniki, Greece

^dSchool of Environmental Science and Engineering, Guangdong Provincial Key Laboratory of Environmental Pollution Control and Remediation Technology, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China

^eDepartment of Chemistry, International Hellenic University, GR-654 04 Kavala, Greece

e-mail: dlambro@chem.auth.gr

Περίληψη

Ο στόχος αυτής της εργασίας ήταν η σύνθεση ενός δικτυωμένου επαμφοτερίζοντος πολυμερούς, παράγωγου της χιτοζάνης και η εφαρμογή του στην απομάκρυνση ενός μίγματος πέντε αντιφλεγμονωδών ενώσεων από υδατικά διαλύματα. Το νέο νανοσύνθετο υλικό αποτελείται από χιτοζάνη (CS) και συντέθηκε με πολυμερισμό ελεύθερων ριζών, χρησιμοποιώντας ακρυλικό μονομερές [2- (μεθακρυλοϋλοξυ) αιθυλ] διμεθυλ- (3-σουλφοπροπυλ) υδροξείδιο του αμμωνίου (MEDSP) ως παράγοντα εμβολιασμού. Ο χαρακτηρισμός του νέου υλικού CS-MEDSP πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας διαφορετικές τεχνικές, όπως φασματοσκοπία υπερύθρου μετασχηματισμού Fourier (FTIR), περίθλαση ακτίνων X (XRD) και ηλεκτρονική μικροσκοπία σάρωσης (SEM). Στην παρούσα μελέτη επιλέχθηκε προς εξέταση ένα μείγμα φαρμακευτικών προϊόντων από την ομάδα των αντιφλεγμονωδών: δικλοφενάκη, ιβουπροφαίνη, κετοπροφαίνη, παρακεταμόλη και σαλικυλικό οξύ (σε ίσες συγκεντρώσεις). Μελετήθηκε η προσρόφηση τους σε διαφορετικές τιμές pH καταλήγοντας στο συμπέρασμα ότι το pH = 4 ήταν η βέλτιστη τιμή. Με χρήση διαφορετικών μοντέλων ισόθερμων, αξιολογήθηκαν τα δεδομένα ισορροπίας της προσρόφησης των μελετώμενων ενώσεων. Για την ανίχνευση τους, χρησιμοποιήθηκε σύστημα υγρής χρωματογραφίας συζευγμένης με φασματομετρία μάζας (LC-MS). Τα αποτελέσματα έδειξαν υψηλή ικανότητα προσρόφησης / εκρόφησης του νέου νανοσύνθετου υλικού καθιστώντας το κατάλληλο για την απομάκρυνση των συγκεκριμένων φαρμακευτικών ενώσεων από υδατικά συστήματα.

Abstract

The goal of this work was the application of a synthesized cross-linked and grafted zwitterionic chitosan derivative to the removal of a mixture of five anti-inflammatory compounds from aqueous matrix. This floating polymer supported nanocomposite material consisting of bio-based chitosan (CS) and was synthesized by free radical polymerisation, using acrylic monomer [2-(Methacryloyloxy)ethyl]dimethyl-(3-sulfopropyl)ammonium hydroxide (MEDSP) as grafting agent. The composition and morphology of new CS-MEDSP material was characterized before and after adsorption, by using different procedures, for instance Fourier Transform Infrared spectroscopy (FTIR), X-ray powder diffraction (XRD) and Scanning electron microscopy (SEM). As model pollutants a mixture of pharmaceuticals from the group of anti-inflammatories was employed: diclofenac, ibuprofen, ketoprofen, paracetamol and salicylic acid (equal concentrations). An adsorption assessment was performed at different pH values concluding that pH=4 was the optimum value. By testing different isotherm models, the equilibrium data for the adsorption of the target compounds were evaluated. For the detection of compounds, an LC-MS system was utilized, in both ionisation modes. Accordingly, results indicated a high adsorption/desorption ability of tested material being suitable for disposal of the certain remedies from aqueous systems.

Βιοεκτυπώσιμα πολυμερικά ικριώματα χιτοζάνης-πηκτίνης με αυξημένη βιοπροσκόλληση κυττάρων για εφαρμογές στην ανάπτυξη δέρματος

Κεχαγιά Α., Μπικιάρης Δ.

Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: irokechagia@gmail.com

Η χιτοζάνη και η πηκτίνη είναι δυο βιοδιασπώμενα φυσικά πολυμερή που έχουν μελετηθεί εκτεταμένα σε συστήματα χορήγησης φαρμακευτικών σκευασμάτων κυρίως λόγω της βιοσυμβατότητας και της χαμηλής τοξικότητάς τους. Τα πολυμερή αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην ανάπτυξη ικριωμάτων που στοχεύουν στην αναγέννηση ιστών. Η εκτύπωση των πολυμερών στοχεύει στην δημιουργία ενός πλαισίου στήριξης, το οποίο χρησιμεύει ως πλατφόρμα για την τοποθέτηση κυττάρων, την προσκόλληση τους, τη μετανάστευση, τον πολλαπλασιασμό και την τελική διαφοροποίηση τους που οδηγεί στην ανάπτυξη ενός νέου λειτουργικού ιστού.

Σκοπός της παρούσας εργασίας ήταν η παρασκευή ικριωμάτων χιτοζάνης-πηκτίνης που θα μπορούν ως βιοσυμβατά και βιοαποικοδομήσιμα πολυμερή να χρησιμοποιηθούν για την ανάπτυξη του δέρματος. Για την παρασκευή των ικριωμάτων χρησιμοποιήθηκαν διάφορες αναλογίες χιτοζάνης και πηκτίνης και μελετήθηκε η εκτύπωση τους σε 3D βιοεκτυπωτή. Για την επιλογή του κατάλληλου βιομελανιού εκτύπωσης τα διαλύματα που παρασκευάστηκαν μελετήθηκαν ως προς το ιξώδες τους με τη μέθοδο της ρεολογίας.

Επίσης, δοκιμάστηκαν διάφορα μέσα δικτύωσης καθώς και τρόποι αφυδάτωσης (ξήρανση σε θερμοκρασία δωματίου ή με λυοφιλίωση). Τέλος, τα ικριώματα απεικονίστηκαν μέσω μικροφωτογραφιών SEM και του οπτικού μικροσκοπίου. Έπειτα, τα ικριώματα μελετήθηκαν με τη Φασματοσκοπία Υπέρυθρου με μετασχηματισμό Fourier με σκοπό να διαπιστωθεί η αλληλεπίδραση των πολυμερών που χρησιμοποιήθηκαν, καθώς και με τη μέθοδο της διαφορικής θερμιδομετρίας σάρωσης (DSC), και της περίθλασης ακτίνων X (X-Ray Diffraction, XRD). Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε διόγκωση των ικριωμάτων, μέτρηση της προόδου αφυδάτωσης, ενζυμική υδρόλυση σε SBF, και τέλος προσκόλληση και πολλαπλασιασμός κυττάρων. Τα αποτελέσματα της εργασίας μαρτυρούν την επιτυχή παρασκευή ικριωμάτων και την ανάπτυξη κυττάρων στα ικριώματα χιτοζάνης-πηκτίνης.

Σύνθεση και μελέτη συμπολυμερών πολυ(γαλακτικού οξέος)- πολυ(αδιπικού αιθυλενεστέρα) με την τεχνική ανάμιξης τήγματος για ενθυλάκωση αντικαρκινικών φαρμάκων.

Τσαχουρίδης, Κ.*, Χριστοδούλου, Ε., Μπικιάρης, Δ.

Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη.

***e-mail:** tsaxconofdarkness@gmail.com

Το πολυ(γαλακτικό οξύ) (PLA), καθώς και το συμπολυμερές του πολυ(γαλακτικό γλυκολικό οξύ) (PLGA), αποτελούν δύο ευρέως διαδεδομένα πολυμερή, λόγω των εξαιρετικών ιδιοτήτων τους, της βιοσυμβατότητας και της βιοαποικοδομησιμότητας τους. Προκειμένου να ρυθμιστεί περαιτέρω η συμπεριφορά κρυστάλλωσης και ο βαθμός αποικοδόμησής τους –παράγοντες καθοριστικοί ιδίως στο πεδίο της φαρμακευτικής τεχνολογίας-, τα δύο αυτά πολυμερή συχνά συνδυάζονται με άλλα πολυμερή (είτε με συμπολυμερισμό τους, είτε σε μορφή μιγμάτων) ή/και με διάφορα (νανο)πρόσθετα.

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας ήταν η σύνθεση και μελέτη συμπολυμερών, δύο εμπορικά διαθέσιμων PLA και PLGA με τον πολυ(αδιπικό αιθυλενεστέρα) (PEAd), κάνοντας χρήση της τεχνικής ανάμιξης τήγματος (reactive melt mixing) ως εναλλακτική της αντίδρασης πολυμερισμού διάνοιξης δακτυλίου (ROP). Οι αντιδράσεις πραγματοποιήθηκαν με διαφορετικές αναλογίες μαζών των αντιδρώντων (PLA/PEAd και PLGA/PEAd), και η πρόοδος τους μελετήθηκε με φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού ($^1\text{H}/^{13}\text{C}$ NMR), καθώς και με ιξωδομετρία στα δείγματα που παραλήφθηκαν σε καθορισμένα χρονικά διαστήματα.

Το σύνολο των παρασκευασθέντων υλικών χαρακτηρίστηκε πλήρως με ένα συνδυασμό μεθόδων και τεχνικών (φασματοσκοπία, περιθλασιμετρία, θερμοδομετρία κτλ.). Ιδιαίτερη έμφαση δώθηκε στη μελέτη της (ενζυμικής) υδρόλυσης των παραγόμενων πολυεστέρων, καθώς και στην κρυσταλλικότητα τους, δύο παράμετροι που επηρεάζονται άμεσα από την εισαγωγή του PEAd στην πολυμερική αλυσίδα. Τα συμπολυμερή τέλος, χρησιμοποιήθηκαν για σύνθεση νανοσωματιδίων με σκοπό την ελεγχόμενη απελευθέρωση του αντικαρκινικού θεραπευτικού φαρμάκου πακλιταξέλη και ακολούθησε χαρακτηρισμός τους.

Παρασκευή και μελέτη ιδιοτήτων φιλμ πολυ(γαλακτικού οξέος) με νανοσωματίδια χιτοζάνης-ενθυλακκωμένου αιθέριου ελαίου ρίγανης

Αικατερίνη Ι. Καζάκου¹, Αχιλίας Δημήτριος¹

¹Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη

e-mail: aikazakou@chem.auth.gr

Τα τελευταία χρόνια, στη συσκευασία τροφίμων έχει αποκτήσει ιδιαίτερο ενδιαφέρον η ανάπτυξη φιλμ πολυμερικών υλικών τα οποία αφενός μεν να είναι βιο-αποικοδομήσιμα και αφετέρου να παρουσιάζουν βελτιωμένες ιδιότητες, όπως αντιοξειδωτική ή/και αντιμικροβιακή δράση. Ένα από τα πλέον υποσχόμενα βιο-προερχόμενα πολυμερή είναι το πολυ(γαλακτικό οξύ), PLA. Ως φυσικά δε αντιοξειδωτικά θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν χημικές ενώσεις οι οποίες εμπεριέχονται στο αιθέριο έλαιο φυτών, όπως η ρίγανη, που υπάρχουν σε αφθονία στην Ελλάδα. Ο στόχος βέβαια είναι να δημιουργηθούν οι καταλληλότερες συνθήκες για την ενθυλάκωση του αιθέριου ελαίου μέσα στην πολυμερική μήτρα ούτως ώστε να αποφευχθεί η πλήρης απομάκρυνσή του πριν τη χρήση του.

Στη παρούσα πτυχιακή εργασία πραγματοποιήθηκε ενθυλάκωση αιθέριου ελαίου ρίγανης σε νανοσωματίδια χιτοζάνης εφαρμόζοντας μια διαδικασία δύο βημάτων: γαλακτωματοποίηση ελαίου σε νερό (O/W) και ιοντική πηκτωματοποίηση της χιτοζάνης με τριπολυφωσφορικό οξύ (TPP) για δύο διαφορετικές ποσότητες αιθέριου ελαίου (0,04 και 0,32 g). Για τον έλεγχο της επιτυχίας της ενθυλάκωσης εφαρμόστηκε η μέθοδος της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου με Μετασχηματισμό Fourier (FT-IR), ενώ με εφαρμογή της μεθόδου Θερμοσταθμικής Ανάλυσης (TGA) έγινε μια εκτίμηση του ποσοστού ενθυλάκωσης του αιθέριου ελαίου ρίγανης στη χιτοζάνη. Στη συνέχεια, έγινε προσθήκη των νανοσωματιδίων σε πολυ(γαλακτικό οξύ) και παρασκευάστηκαν φιλμ πολυ(γαλακτικού οξέος) με νανοσωματίδια χιτοζάνης-ενθυλακκωμένου αιθέριου ελαίου χρησιμοποιώντας διαφορετικές περιεκτικότητες του πρόσθετου (1%, 5% και 10%). Ένα σύνολο εργαστηριακών τεχνικών, όπως FTIR, TGA, DSC χρησιμοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό των ιδιοτήτων των φιλμ. Στη συνέχεια μελετήθηκε η αντιοξειδωτική δράση των φιλμ με τη μέθοδο DPPH και τη χρήση του φασματοφωτόμετρου UV-VIS. Από τη μελέτη της αντιοξειδωτικής ικανότητας προέκυψε ότι τα νανοσωματίδια ενισχύουν την αντιοξειδωτική ικανότητα του πολυ(γαλακτικού οξέος). Τα αποτελέσματα του FT-IR έδειξαν ότι τα νανοσωματίδια προσροφήθηκαν στην επιφάνεια της χιτοζάνης. Η θερμοσταθμική ανάλυση TGA έδειξε ότι η παρουσία των νανοσωματιδίων αυξάνει σε ένα βαθμό την θερμική σταθερότητα του πολυ(γαλακτικού οξέος). Τέλος, από τη μέθοδο της διαφορικής θερμιδομετρίας σάρωσης υπολογίστηκαν το σημείο τήξης (Tm) και τη θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης (Tg) των φιλμ.

Σύνθεση και χαρακτηρισμός νανოსύνθετων υλικών του πολυ(γαλακτικού οξέος), PLA, με νανοσωματίδια Ag, TiO₂ ή ZnO

Ηλέκτρα Μαυροματίδου¹, Ιωάννης Τσαγκαλιάς¹, Δημήτρης Αχιλιάς¹

¹*Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη*

Δημήτρης Αχιλιάς: axilias@chem.auth.gr, **Γιάννης Τσαγκαλιάς:** itsagkal08@gmail.com,

Ηλέκτρα Μαυροματίδου: eleblack1998kk@gmail.com

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία, πραγματοποιήθηκε η σύνθεση φιλμ του βιοδιασπώμενου πολυ(γαλακτικού οξέος), PLA καθώς και νανოსύνθετων υλικών του με νανοσωματίδια Ag, TiO₂ και ZnO με την τεχνική της ανάμιξης σε διάλυμα (solution casting). Το PLA αποτελεί ένα ευρέως χρησιμοποιούμενο πολυμερικό υλικό λόγω των φυσικών, χημικών και μηχανικών ιδιοτήτων του, αλλά κυρίως λόγω του ότι θεωρείται ως βιοδιασπώμενο υλικό (για την ακρίβεια είναι κομποστοποιήσιμο υλικό). Νανοσωματίδια Ag παρασκευάστηκαν με αναγωγή διαλύματος AgNO₃. Η διαδικασία του solution casting πραγματοποιήθηκε για δύο διαφορετικές συγκεντρώσεις του νανοπρόσθετου στο πολυμερές που αντιστοιχούν σε 0.1% και 0.2 % w/w νανοπρόσθετου σε PLA.

Σύμφωνα με την δεδομένη μελέτη, η παρουσία των νανοσωματιδίων επηρέασε τις φυσικές και χημικές ιδιότητες του καθαρού PLA σε μεγαλύτερο ή σε μικρότερο βαθμό. Ο προσδιορισμός των ιδιοτήτων τόσο του καθαρού PLA όσο και των σύνθετων υλικών PLA/NPs πραγματοποιήθηκε μέσω εργαστηριακών τεχνικών μεθόδου χαρακτηρισμού όπως φασματοσκοπία HATR-IR και UV-VIS και θερμιδομετρία DSC.

Συγκεκριμένα, από την HATR-IR, τα υλικά εξετάστηκαν ως προς την ομοιογένειά τους και αποσαφηνίστηκε ο τρόπος ενσωμάτωσης και η ποιότητα διασποράς των ανόργανων προσθέτων στο πολυμερές. Από την DSC, διαπιστώθηκε πως η θερμοκρασία υαλώδους μετάβασης, T_g αυξάνεται με τη συγκέντρωση του πρόσθετου στο φιλμ. Ωστόσο στις περισσότερες περιπτώσεις σύνθετων υλικών παρατηρήθηκε μείωση της T_g. Από την φασματοσκοπία UV-Vis, παρατηρήθηκε πως για μεγαλύτερες συγκεντρώσεις αντιοξειδωτικού υλικού προκύπτει εντονότερη αναγωγή του DPPH. Μάλιστα, τα νανοςύνθετα υλικά σε σχέση με το φιλμ του καθαρού PLA βελτιστοποιούν την αντιοξειδωτική ικανότητα του PLA. Το πιο αξιοσημείωτο αποτέλεσμα αφορά στο νανοςύνθετο φιλμ με TiO₂ του οποίου η δράση δημιούργησε ιδιαίτερες εντυπώσεις.

Τέλος, η δεδομένη μελέτη έχει ως έναν από τους απώτερους σκοπούς της να δώσει το έναυσμα για περαιτέρω μελέτη επί του θέματος. Μάλιστα, σημαντική κρίνεται η μελέτη του μεγέθους των νανοπρόσθετων με τη μέθοδο TEM, έτσι ώστε να αποσαφηνιστεί το πιο κατάλληλο τελικό μέγεθος για τη βέλτιστη δράση τους ως ανόργανα πρόσθετα σε πολυμερική μήτρα. Έξω από τα πλαίσια τους πειραματικού μέρους της δεδομένης μελέτης, ενδιαφέρον αποτελεί κι ο έλεγχος των αντιμικροβιακών ιδιοτήτων των νανοπρόσθετων αλλά και η ποσότητα που κρίνεται κατάλληλη για αυτή τη δράση τους.

Λέξεις Κλειδιά: πολυ(γαλακτικό οξύ), PLA, νανοςύνθετα υλικά, νανοσωματίδια Ag, ZnO, TiO₂

Σύνθεση και χαρακτηρισμός βιοσυμβατής υδρογέλης Pluronic με φυσικά πολυμερή για 3D εκτύπωση

Ιωάννα Κουμεντάκου^α, Ζωή Τερζοπούλου^β, Δημήτριος Μπικιάρης^γ

^{α,β,γ}Εργαστήριο Οργανικής Χημικής Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

^α [iwanna.koumentakou@gmail.com](mailto:iwana.koumentakou@gmail.com), ^β terzoe@gmail.com, ^γ dbic@chem.auth.gr

Η τρισδιάστατη εκτύπωση έχει σημειώσει ραγδαία εξέλιξη τις τελευταίες δύο δεκαετίες. Είναι μια πρωτοποριακή τεχνολογία που επιτρέπει τη δημιουργία τρισδιάστατων ιστών ή οργάνων για εμφύτευση, μοντέλα ιστών και μελέτες αλληλεπίδρασης κυττάρου-υλικού μέσω ενός σχεδιαστικού μοντέλου με τη βοήθεια υπολογιστή. Οι υδρογέλες, οι οποίες είναι πολυμερικά δίκτυα με υψηλή περιεκτικότητα σε νερό, αποτελούν έναν τύπο βιοϋλικού που χρησιμοποιείται συχνά στη 3D εκτύπωση λόγω της υψηλής βιοσυμβατότητάς τους.

Το Pluronic είναι μια θερμοευαίσθητη, βιοσυμβατή υδρογέλη, μη τοξική και θεωρείται ένα από τα καλύτερα εκτυπώσιμα βιοϋλικά στη μηχανική των ιστών. Στην παρούσα εργασία, παρασκευάστηκαν υδρογέλες με Pluronic ενισχυμένες με συνθετικά και φυσικά βιοσυμβατά πολυμερή για την τρισδιάστατη εκτύπωση ικριωμάτων με βελτιωμένα φυσικοχημικά και βιολογικά χαρακτηριστικά. Συγκεκριμένα, προστέθηκε η χιτοζάνη, ένας φυσικός πολυσακχαρίτης με εξαιρετικές ιδιότητες όπως υδροφιλία, βιοσυμβατότητα, βιοαποικοδομησιμότητα, αντιβακτηριακή και αιμοστατική δραστηριότητα, υψηλή ικανότητα προσρόφησης νερού, και πολύ χαμηλή τοξικότητα. Οι υδρογέλες ενισχύθηκαν με ζελατίνη, η οποία βοηθά στην πρόσφυση, τη μετανάστευση, τον πολλαπλασιασμό, των κυττάρων και στην βελτιστοποίηση των δομικών χαρακτηριστικών της υδρογέλης για ακριβή εκτύπωση.

Συντέθηκαν πολυμερικές υδρογέλες με διαφορετικές αναλογίες Pluronic, χιτοζάνης και ζελατίνης, οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν για την εκτύπωση τρισδιάστατων ικριωμάτων. Μελετήθηκε η εκτυπωσιμότητα και τα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά των υδρογελών με τις τεχνικές SEM, FT-IR, XRD και DSC.

Ευχαριστίες

Αυτή η έρευνα συγχρηματοδοτήθηκε από το Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης (ΕΤΠΑ) και από εθνικούς πόρους μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος "Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία", NSRF 2014-2020, με την ονομασία "Υδατοκαλλιέργεια" - "Βιομηχανικά υλικά" - "Ανοιχτή καινοτομία στον πολιτισμό" (κωδικός έργου: Τ6ΥΒΠ-00288).

Παρασκευή και μελέτη συμπολυμερών πολυ(βανιλικού αιθυλενεστέρα) - πολυ(φουρανικού αιθυλενεστέρα).

Ευαγγελία Δ. Μπάλλα^α, Αλεξάνδρα Ζαμπούλη^β, Λάζαρος Παπαδόπουλος^γ, Δημήτριος Μπικιάρης^δ

^{α,β,γ}Εργαστήριο Οργανικής Χημικής Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

^α euagelia226@gmail.com, ^β azamboulis@gmail.com, ^γ lazaros.geo.papadopoulos@gmail.com
^δ dbic@chem.auth.gr

Στην παρούσα μελέτη, συντέθηκαν και μελετήθηκαν συμπολυμερή με βάση τον πολυ(βανιλικό αιθυλενεστέρα) (PEV) και τον πολυ(φουρανικό αιθυλενεστέρα) (PEF). Έγινε αρχικά σύνθεση του μονομερούς 2-υδροξυαιθύλενου βανιλικού οξέος, έπειτα των oligομερών PEF και στη συνέχεια έγινε πολυμερισμός τους σε διαφορετικές αναλογίες. Τα προκύπτοντα συμπολυμερή πολυ(βανιλικού αιθυλενεστέρα)- πολυ(φουρανικού αιθυλενεστέρα) αναφέρονται ως PEFV. Η επιτυχής σύνθεση των συμπολυμερών επιβεβαιώθηκε και μελετήθηκαν περαιτέρω τα δομικά, κρυσταλλογραφικά, φασματοσκοπικά χαρακτηριστικά και οι θερμικές τους ιδιότητες. Αυτά προσδιορίστηκαν με: φασματοσκοπία υπερύθρου (FT-IR), φασματοσκοπία πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού (¹H και ¹³C NMR), κρυσταλλογραφία ακτίνων X (XRD), ιξωδομετρία (IV) και διαφορική θερμιδομετρία σάρωσης (DSC). Το ιξώδες των συμπολυμερών υπολογίστηκε από 0,11 - 0,17 dL/g, ενώ δεν φαίνεται να μεταβάλλεται αναλογικά με την μεταβολή της περιεκτικότητας του εκάστοτε συμμονομερούς. Η άμορφη δομή των συμπολυμερών επιβεβαιώθηκε από τα αποτελέσματα των μετρήσεων του DSC και XRD. Σύμφωνα με το DSC οι θερμοκρασίες υαλώδους μετάβασης κυμαίνονται στους 78 - 82 °C.

Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με δύο ενεργές ομάδες πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού

Δανιηλίδης Βασίλειος^{*1}, Λυκίδου Σμαρώ^{*2}, Νικολαΐδης Νικόλαος^{*3}, Καρανίκας Ευάγγελος^{*4},

Εργαστήριο Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, 54124, Θεσσαλονίκη

**1basdanil17@gmail.com, *2slykidou@chem.auth.gr, *3nfnikola@chem.auth.gr,*

**4vagkaran@gmail.com*

Τα χρώματα αντίδρασης είναι έγχρωμες ενώσεις που είναι δυνατόν να σχηματίσουν ομοιοπολικούς δεσμούς με τις δραστικές ομάδες της ίνας κι έτσι συγκρατούνται σε αυτήν. Αυτού του είδους οι δεσμοί σχηματίζονται με τις τελικές υδροξυλικές ομάδες (-OH) των κυτταρινικών ινών. Έχουν καλές ιδιότητες αντοχής εξαιτίας του δεσμού αυτού με το υπόστρωμα. Τα χρώματα αντίδρασης χρησιμοποιούνται στη βαφή των κυτταρινικών ινών, όπως το βαμβάκι, το οποίο αποτελεί και τη μελετώμενη ίνα.

Η τεχνολογία της υπερδιήθησης (ultrafiltration) αποτελεί μία τεχνολογία που εφαρμόζεται κυρίως για την αφαλάτωση του νερού, καθώς και για την επεξεργασία των αποβλήτων. Σκοπό της παρούσας εργασίας αποτελεί η μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με δύο ενεργές ομάδες πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού. Οι βαφές πραγματοποιήθηκαν στους 60°C. Τα λουτρά βαφής καθώς και τα βαμμένα υφάσματα χρησιμοποιήθηκαν για τον καθορισμό της εξάντλησης του χρώματος αντίδρασης σε διάφορους τόνους, τον καθορισμό του χρόνου που χρειάζεται για να προκύψει 50% συγκράτηση (fixation) μετά την προσθήκη Na₂CO₃ (T50), το καθορισμό της επίδρασης της παρουσίας μετάλλων κατά τη βαφή, το καθορισμό της έλξης της ίνας με το χρώμα (substantivity), της εξάντλησης του χρώματος (exhaustion) και της συγκράτησης (fixation) στην ίνα, τη διεξαγωγή συμπερασμάτων σχετικά με τη μετανάστευση του χρώματος (migration test).

Μελέτη των κινητικών ιδιοτήτων χρώματος αντίδρασης άλατος νατρίου με μια ενεργό ομάδα πριν και μετά την υπερδιήθηση σε υπόστρωμα βαμβακιού

Ελευθερία Γιτσούλη, Σμαρώ Λυκίδου, Νικόλαος Νικολαΐδης
Εργαστήριο Χημείας & Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, 54124, Θεσσαλονίκη
elefthgi@chem.auth.gr και slykidou@chem.auth.gr

Στις μέρες μας, στην βιομηχανία της μόδας είναι πολύ συχνή η βαφή βαμβακερών υφασμάτων με πληθώρα χρωμάτων. Τα πιο συχνά που χρησιμοποιούνται είναι τα χρώματα αντίδρασης. Γι' αυτόν τον λόγο η παρούσα πτυχιακή εργασία στοχεύει στην μελέτη και την καταγραφή των κινητικών ιδιοτήτων ενός αζωχρώματος αντίδρασης, το οποίο παρασκευάστηκε στο εργαστήριο και περιέχει μια ενεργό ομάδα η οποία αντιδρά με την υφάνσιμη ίνα. Για την κατανόηση του μηχανισμού της βαφής εξετάστηκαν οι φυσικοχημικές ιδιότητες της φυσικής ίνας, οι βασικές αρχές του χρώματος ως μέγεθος καθώς και τα δομικά χαρακτηριστικά των χρωστικών που τα καθιστούν κατάλληλα για την βαφή ινών. Η εργαστηριακή πρακτική περιλάμβανε την εισαγωγή βαμβακερών υφασμάτων σε κυκλική συσκευή βαφής απ' όπου εξήχθησαν συμπεράσματα για τον τόνο βαφής υπερδιηθημένου και μη υπερδιηθημένου χρώματος, για τον χρόνο όπου επιτυγχάνεται 50% συγκράτηση χρώματος, για την μετανάστευση του χρώματος σε περιοχές με μικρότερη συγκέντρωση, για την επίδραση που έχουν τα μέταλλα στην διαδικασία της βαφής καθώς και για την σημασία των βοηθητικών βαφής (αλάτων) στην συγκράτηση του χρώματος. Τα αποτελέσματα σχετίζονται με την εξάντληση του χρώματος, την συνάφεια (συγγένεια) υποστρώματος-βαφής και την συγκράτηση του χρώματος στην ίνα.

Κινητική πολυμερισμού κυανοακρυλικής κόλλας για την αποκατάσταση γυάλινων επιφανειών, με την Φασματοσκοπία Υπερύθρου

Παναγιώτης Μόρφης, Ευαγγελία Βουβούδη, Δημήτρης Αχιλιάς

Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, ΤΚ. 54124

Θεσσαλονίκη

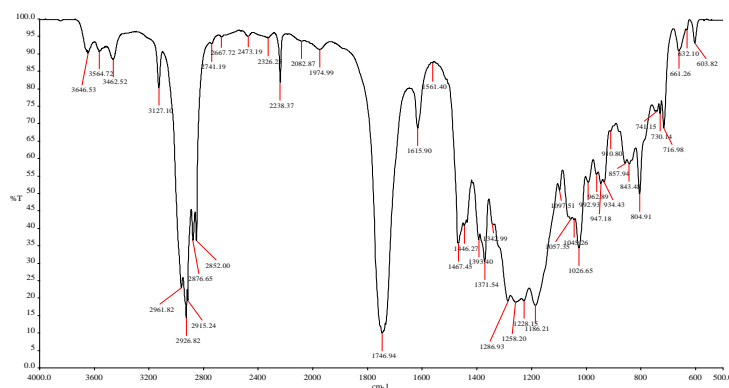
panagiotisbmorfis@hotmail.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι κυανοακρυλικές κόλλες είναι συγκολλητικές ουσίες χαμηλού ιξώδους και ταχείας σκλήρυνσης, οι οποίες χρησιμοποιούνται συνήθως σε περιπτώσεις εφαρμογών που απαιτείται γρήγορη συγκόλληση. Η χρήση τους ως συγκολλητικών μέσων έχει αυξηθεί σημαντικά τα τελευταία χρόνια λόγω του συνδυασμού να πολυμερίζονται γρήγορα σε θερμοκρασίες περιβάλλοντος, να ανταποκρίνονται σε διάφορα είδη υποστρωμάτων, να μην απαιτούν ειδικό εξοπλισμό κι ειδικές γνώσεις από τον συντηρητή. Συνεπώς είναι εμφανείς οι λόγοι που ευρίσκονται ευρέως στο πεδίο της συντήρησης έργων τέχνης.

Ο πολυμερισμός γίνεται μέσω αντιδράσεων ανιοντικού πολυμερισμού, χρησιμοποιώντας ως ήπιο πυρηνόφιλο μέσο το νερό και την ικανότητά του να προσελκύσει e^- από τους C στις ομάδες $-COOR$ και $-CN$ ομάδες. Στις περισσότερες περιπτώσεις, η υγρασία της ατμόσφαιρας ή της επιφάνειας συγκόλλησης αρκεί για να ξεκινήσει ο πολυμερισμός μέσα σε λίγα λεπτά. Η παρακολούθηση της προόδου του πολυμερισμού γίνεται μέσα από εμβαδομέτρηση των κορυφών στα 1615 και 1740 cm^{-1} , που αντιστοιχούν στον μεταβαλλόμενο βινυλικό δεσμό $C=C$ και στον αμετάβλητο εστερικό καρβονύλιο $C=O$, σε καθορισμένα χρονικά διαστήματα.

Παρατηρήθηκε ότι σε σταθερή θερμοκρασία περιβάλλοντος (25 ± 1 °C) ο βαθμός μετατροπής του κυανοακρυλικού πολυμερούς έφθασε το 80% μετά από 6 h κι ότι είναι δυνατόν να πολυμεριστεί πλήρως το υλικό μετά από 12-18 h (>99%). Δεν παρουσιάζει όμως καλή αντοχή στη γήρανση καθώς τόσο σε συνθήκες υψηλής θέρμανσης όσο και σε υπεριώδη ακτινοβολία το πολυμερές κιτρινίζει έντονα, διασπώντας την συνεκτική δομή του και παράγοντας εστερικά και κυανικά παραπροϊόντα. Συνεπώς, επαληθεύτηκε η χρήση της κόλλας για περιορισμένους χρόνους και μικρής έκτασης εφαρμογές.



Εικόνα: φάσμα υπέρυθρου του κυανοακρυλικού πολυμερούς

Μελέτη της απελευθέρωσης διοξειδίου του άνθρακα από φρυγμένους κυάμους καφέ

Κωνσταντίνα Τυχάλα,¹ Παναγιώτα Ζακίδου,¹ Ευδοξία-Μαρία Βάρκα,² Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου¹

¹Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

²ΑΒΕΚ Α.Ε. Τμήμα Ποιοτικού ελέγχου και Ανάπτυξης, ΤΚ 57200
Καβαλάρι Θεσσαλονίκης, Ελλάδα

ktychala@gmail.com, zakidou@gmail.com, evarka@avek.gr, adparask@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Ο καφές αποτελεί το πιο διαδομένο ρόφημα σε όλο τον κόσμο, ιδιαίτερα στην Ευρώπη. Παράγεται από φρυγμένους και αλεσμένους κυάμους καφέ, κυρίως, των δύο πιο γνωστών ποικιλιών *Arabica* και *Robusta*.

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η κινητική απελευθέρωσης του διοξειδίου του άνθρακα από φρυγμένους κυάμους καφέ ποικιλίας *Arabica*, οι οποίοι είτε είχαν υποβληθεί σε διαφορετικού βαθμού φρύξη (*light, medium, dark roasting*), είτε είχαν υποστεί άλεση ή είχαν συσκευασθεί απουσία ή παρουσία αζώτου. Ταυτόχρονα πραγματοποιήθηκε χαρακτηρισμός της χημικής σύστασης (π.χ. περιεκτικότητα σε υγρασία, τέφρα, λίπος, πρωτεΐνες, σάκχαρα) και των μορφολογικών χαρακτηριστικών (όγκος, χρώμα, πυκνότητα, κατανομή μεγέθους) τόσο των πράσινων όσο και των φρυγμένων κυάμων καφέ.

Όπως διαπιστώθηκε, τόσο η χημική σύσταση όσο και τα μορφολογικά χαρακτηριστικά των κυάμων μεταβλήθηκαν κατά τη διάρκεια της φρύξης, με κυριότερα τη μείωση της περιεκτικότητας σε υγρασία και σε υδατάνθρακες, την αύξηση του όγκου και του πορώδους, τη μείωση της πυκνότητας και την ενίσχυση του χρώματος, εξαιτίας των διεργασιών που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό των κυάμων αλλά και λόγω της παραγωγής αερίων, όπως το διοξείδιο του άνθρακα. Τα αποτελέσματα της παρακολούθησης της απελευθέρωσης του διοξειδίου του άνθρακα για χρονικό διάστημα 7 ημερών έδειξαν πως όσο μεγαλύτερου βαθμού είναι η φρύξη τόσο μεγαλύτερη η ποσότητα διοξειδίου του άνθρακα που απελευθερώνεται από τους κυάμους, λόγω των περισσότερων αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα στο εσωτερικό του. Η άλεση των φρυγμένων κυάμων οδήγησε αρχικά σε αύξηση της ποσότητας και του ρυθμού απελευθέρωσης, η οποία στη συνέχεια μειώθηκε σε επίπεδα κατώτερα των αντίστοιχων ολόκληρων κυάμων. Τέλος, η παρουσία του αζώτου φάνηκε να επηρεάζει τον ρυθμό απελευθέρωσης του διοξειδίου του άνθρακα και, πιο συγκεκριμένα, όσο περισσότερο άζωτο υπάρχει τόσο ελαττώνεται η ποσότητα του διοξειδίου του άνθρακα που απελευθερώνεται.

Παρακολούθηση μεταβολών στο χρώμα και την υφή επιτραπέζιας πράσινης ελιάς ποικιλίας Χαλκιδική μειωμένης αλατοπεριεκτικότητας κατά την αποθήκευση σε αρωματισμένο με αιθέρια έλαια παρθένο ελαιόλαδο

Μαρία Παπαποστόλου¹, Φανή Μαντζουρίδου^{1,2} και Μαρία Ζ. Τσιμιδου^{1,2*}

¹Εργαστήριο Χημείας & Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, 54124

²Κέντρο Αριστείας Φυσικών Προϊόντων (Nat-Pro), Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), ΑΠΘ, 57001

papaposm@chem.auth.gr, fmantz@chem.auth.gr, *tsimidou@chem.auth.gr

Πράσινες ελιές ποικιλίας Χαλκιδική που ζυμώθηκαν με τον παραδοσιακό τρόπο σε βιομηχανική κλίμακα υποβλήθηκαν στο εργαστήριο σε επεξεργασία μερικής αφαλάτωσης έτσι ώστε να μπορεί να φέρει το διατροφικό ισχυρισμό «με μειωμένο αλάτι» και συσκευάστηκαν υπό κενό παρουσία παρθένου ελαιολάδου αρωματισμένου με επιλεγμένα αιθέρια έλαια (ΑΕ) από βότανα της Ελληνικής χλωρίδας. Τα πειράματα διατηρησιμότητας του προϊόντος διεξήχθησαν συστηματικά με τη βοήθεια πειραματικού σχεδιασμού και συγκεκριμένα μέσω της μεθοδολογίας επιφάνειας απόκρισης (RSM). Ως ανεξάρτητες μεταβλητές ($n = 4$) ορίστηκαν οι συγκεντρώσεις των τριών ΑΕ που χρησιμοποιήθηκαν (ρίγανη, μελισσόχορτο, δάφνη) όπως επίσης και ο χρόνος αποθήκευσης. Στην εργασία παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για την τυχόν επίδραση που είχε ο τρόπος συντήρησης του προϊόντος στο χρώμα και την υφή που αποτελούν σημαντικά ποιοτικά χαρακτηριστικά καθοριστικά για την εμπορευσιμότητα της πράσινης επιτραπέζιας ελιάς. Για το λόγο αυτό, εκτιμήθηκαν χρωματομετρικές παράμετροι (a^* και b^* , απόχρωση κόκκινο/πράσινο και κίτρινο/μπλέ, αντίστοιχα), παράγωγα μεγέθη τους όπως το C^* (κορεσμός) και h^* (χρoιά) και η δύναμη διάτρησης επιδερμίδας (N), με κατάλληλες αντικειμενικές μεθόδους ή εξισώσεις. Τα πολυωνυμικά μοντέλα 2^{ης} τάξης που προέκυψαν από την εφαρμογή του RSM ανέδειξαν τη διαφορετική επίδραση του κάθε ΑΕ στα ποιοτικά χαρακτηριστικά που εξετάστηκαν και υπέδειξαν τη σημαντικότητα των ΑΕ ρίγανης και δάφνης για τη διατήρησή τους σε επιθυμητά επίπεδα τιμών καθ'όλη τη διάρκεια του χρόνου αποθήκευσης. Τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας δείχνουν ότι η χρήση αρωματισμένου παρθένου ελαιολάδου ως μέσο συντήρησης για τις ελιές μειωμένης αλατοπεριεκτικότητας αποτελεί πρακτική που θα μπορούσε άμεσα να ενισχύσει την καινοτομική δραστηριότητα των μικρομεσαίων επιχειρήσεων μεταποίησης της επιτραπέζιας ελιάς με μικρό κόστος καθώς δεν απαιτείται η δέσμευση κεφαλαίου για ενίσχυση της υποδομής της βιομηχανικής μονάδας. Απαραίτητη προϋπόθεση αποτελεί η μικροβιολογική ασφάλεια του προϊόντος κατά την αποθήκευση.

Ευχαριστίες: «Η εργασία υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Δράσης ΕΡΕΥΝΩ – ΔΗΜΙΟΥΡΓΩ - ΚΑΙΝΟΤΟΜΩ και συγχρηματοδοτήθηκε από την Ευρωπαϊκή Ένωση και εθνικούς πόρους μέσω του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα & Καινοτομία (ΕΠΑνΕΚ) (κωδικός έργου:Τ1ΕΔΚ-04174). Για την παροχή της πράσινης ελιάς ποικιλίας Χαλκιδική, θερμές ευχαριστίες στην εταιρία ATHOS OLIVES A.E.»

Παραλαβή και μελέτη φυσικοχημικών ιδιοτήτων πρωτεϊνικών παρασκευασμάτων από τις προνύμφες του *Tenebrio molitor*

Αλκμήνη-Άννα Γκινάλη, Άνθια Ματσακίδου, Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου
Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.
gkinalia@chem.auth.gr, matsakidou@chem.auth.gr, adparask@chem.auth.gr

Αντικείμενο της παρούσας μελέτης ήταν, αρχικά, η παραλαβή πρωτεϊνικών παρασκευασμάτων από τις προνύμφες του *Tenebrio molitor* και, στη συνέχεια, η μελέτη επιλεγμένων φυσικοχημικών τους ιδιοτήτων. Η παραλαβή των πρωτεϊνικών παρασκευασμάτων πραγματοποιήθηκε σε απολιπασμένο άλευρο των προνυμφών με τρεις τρόπους και προέκυψαν τα κλάσματα DF-IP (ισοηλεκτρική καταβύθιση), DF SP (υδατοδιαλυτές πρωτεΐνες) και DF-SSP (αλατοδιαλυτές πρωτεΐνες). Η απόδοση της διεργασίας απομόνωσης των υδατοδιαλυτών πρωτεϊνών ήταν η υψηλότερη ακολουθούμενη από τη διεργασία εκχύλισης με ισοηλεκτρική καταβύθιση. Η ηλεκτροφόρηση των δειγμάτων έδειξε την παρουσία πρωτεϊνών με μοριακά βάρη από 10 έως 130 kDa. Η ικανότητα συγκράτησης νερού και ελαίου αυξήθηκε εμφανώς μετά την απομάκρυνση του λίπους και την απομόνωση των πρωτεϊνικών κλασμάτων. Η διαλυτότητα των πρωτεϊνών ήταν ιδιαίτερα υψηλή στην όξινη και αλκαλική περιοχή τιμών pH, ενώ παρουσίασε την ελάχιστη τιμή της στην περιοχή κοντά στο *pI* των πρωτεϊνών (από 4 έως 5), παρατήρηση η οποία επιβεβαιώθηκε και από τη μέτρηση του ζ-δυναμικού. Τέλος, η μελέτη της επιφανειοδραστικότητας έδειξε ότι στη διεπιφάνεια αέρα/νερού υψηλότερη επιφανειακή δράση εμφάνισε το δείγμα των αλατοδιαλυτών πρωτεϊνών (DF-SSP), ενώ στη διεπιφάνεια ελαίου/νερού το δείγμα των υδατοδιαλυτών πρωτεϊνών (DF SP). Ωστόσο, και τα τρία δείγματα παρουσίασαν υψηλότερη επιφανειοδραστικότητα συγκριτικά με συμβατικές πηγές πρωτεϊνών.

Η παρούσα έρευνα χρηματοδοτήθηκε από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Καινοτομίας (ΓΓΕΚ), με αρ. Σύμβασης Έργου 30.

Παραγωγή καινοτόμων ροφημάτων από υποπροϊόντα της παραγωγής καφέ με τη χρήση β-κυκλοδεξτρίνης

Αναστασία Λούκρη, Πετρούλα Τσιτλακίδου, Αθανασία Μ. Γούλα, Ιωάννης Μουρτζίνος
*Τομέας Επιστήμης και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Γεωπονίας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη*
e-mail: _loukriap@agro.auth.gr, ptsitlak@agro.auth.gr; athgou@agro.auth.gr ,
mourtzinis@agro.auth.gr

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη της βελτιστοποίησης των συνθηκών εκχύλισης από παραπροϊόντα της βιομηχανίας του καφέ καθώς με τη χρήση μη οργανικών διαλυτών και η ανάπτυξη καινοτόμων ροφημάτων. Συγκεκριμένα μελετήθηκε η εκχύλιση καφεΐνης και αντιοξειδωτικών από τη πούλπα του καφέ με τη χρήση υδατικών διαλυμάτων β-κυκλοδεξτρίνης, Και στη συνέχεια εξετάστηκε για πρώτη φορά το οργανοληπτικό προφίλ ροφήματος από το παραπροϊόν με παρουσία και απουσία της κυκλοδεξτρίνης.

Τα υδατικά διαλύματα β-κυκλοδεξτρίνης έχουν συσχετιστεί με τη παραλαβή ενώσεων χαμηλής διαλυτότητας στο νερό καθώς και με επικάλυψη διαφόρων αρνητικών γεύσεων και αρωμάτων. Στα πλαίσια της εργασίας μελετήθηκε η επίδραση των παραγόντων: συγκέντρωση της β-κυκλοδεξτρίνης στο νερό ($C_{\beta cd}$), η θερμοκρασία της εκχύλισης (T) και η αναλογία του διαλύτη ως προς το φυτικό υλικό (L/S) στην εκχύλιση των αντιοξειδωτικών του καφέ και της καφεΐνης. Η αύξηση της θερμοκρασίας και της αναλογίας του υγρού στερεού είχε θετική επίδραση στην εκχυλιστική δύναμη του συστήματος. Όσο αναφορά την συγκέντρωση του διαλύτη παρατηρήθηκε διαφορετική συμπεριφορά λόγω της διαφορετικής φύσης των εκχυλιζόμενων ενώσεων. Στα πλαίσια της εργασίας εξετάστηκε και το οργανοληπτικό προφίλ ροφημάτων κρυσταλλοποίησης από την πούλπα του καφέ. Το ρόφημα παρουσιάζει κοινά χαρακτηριστικά με ρόφημα τσαγιού, με την κυκλοδεξτρίνη να διαφοροποιεί το τελικό γευστικό αποτέλεσμα.

Συμπερασματικά η μεθοδολογία εκχύλισης υπο-προϊόντων παραγωγής καφέ με β-κυκλοδεξτρίνη μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την ανάπτυξη ροφημάτων με ιδιαίτερα οργανοληπτικά χαρακτηριστικά και υψηλή παρουσία βιοενεργών συστατικών και καφεΐνης.

Διερεύνηση αξιοποίησης προϊόντων και παραπροϊόντων χυμοποίησης φρούτων λωτού (*Diospyros kaki* cv. Jiro). I.Αλκοολική ζύμωση συμπυκνωμένου χυμού με μικτή καλλιέργεια ζυμών & II. Ανάλυση του προφίλ των κύριων καροτενοειδών και πηκτίνης στο στερεό υπόλειμμα χυμοποίησης

Δήμητρα Ζερκίδου¹, Σοφία Λάλου¹, Στεργιανή Α. Ορδούδη^{1,2} Φανή Μαντζουρίδου^{1,2}

¹Εργαστήριο Χημείας & Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, 54124, ²Κέντρο Αριστείας Φυσικών Προϊόντων (Nat-Pro), Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), ΑΠΘ, 57001,

e-mail: dimitrachem@gmail.com, lalousofia@gmail.com, steord@chem.auth.gr, fmantz@chem.auth.gr

Η παρούσα εργασία αποτελεί μέρος μιας ευρύτερης μελέτης με σκοπό την αξιοποίηση προϊόντων και παραπροϊόντων χυμοποίησης καρπών λωτού της εμπορικής ποικιλίας Jiro που καλλιεργείται στη Β. Ελλάδα (*Diospyros kaki* L., cv. Jiro). Στο πρώτο στάδιο της έρευνας έγινε παραγωγή συμπυκνωμένου χυμού (απευθείας θέρμανση, προσθήκη μικτής καλλιέργειας δύο άγριων οσμώφιλων στελεχών ζυμών, (από τη συλλογή μικροβίων του EXTT) και ακολούθως μελετήθηκε η πορεία της αλκοολικής ζύμωσής του. Για το σκοπό αυτό ελέγχονταν περιοδικά οι τιμές κρίσιμων φυσικοχημικών παραμέτρων όπως οι συγκεντρώσεις γλυκόζης, φρουκτόζης, αιθανόλης (g/kg), η απόδοση (ethanol yield, g/g), η αποδοτικότητα της διεργασίας (fermentation efficiency, %), καθώς και η βιωσιμότητα των κυτάρων (log₁₀ cfu/mL). Τα πειραματικά αποτελέσματα επιβεβαίωσαν την αντοχή και γρήγορη προσαρμογή των μικροβιακών στελεχών σε υψηλές συγκεντρώσεις σακχάρων (ολικά σάκχαρα συμπυκνωμένου χυμού, 374,16 ± 47,69 g/kg) παρά το ωσμωτικό σοκ που προκαλεί η συνθήκη αυτή. Με βάση τη μέγιστη παραγωγή αιθανόλης (80,1 g/kg) και τη συγκέντρωση υπολειμματικών σακχάρων (γλυκόζη 31,26 ± 6,49 g/kg, φρουκτόζη 143,23 ± 4,79 g/kg), το αλκοολούχο προϊόν κρίθηκε κατάλληλο ως υπόστρωμα οξικής ζύμωσης. Παράλληλα εξετάστηκε η σύσταση του στερεού υπολείμματος της χυμοποίησης (ΣΥΧΛ=μίγμα φλοιού και σάρκας του νωπού φρούτου) σε χαρακτηριστικά βιοδραστικά συστατικά, όπως η πηκτίνη (μετά από εκχύλιση hot-acid και FT-IR), αλλά και ορισμένα καροτενοειδή με δράση προβιταμίνης Α (μετά από εκχύλιση υγρού-υγρού και RP-HPLC-DAD ανάλυση). Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι το κλάσμα καροτενοειδών του ΣΥΧΛ έχει παρόμοια σύσταση με εκείνη του νωπού φρούτου και αποτελείται κατά >50% από συστατικά με προβιταμινική δράση όπως διεστέρες της (all-E)-β-κρυπτοξανθίνης με λαουρικό, μυριστικό και παλμιτικό οξύ, ελεύθερη (all-E)-β-κρυπτοξανθίνη, (all-E)- καθώς και ισομερές 9-Z μορφή του β- και (all-E)-α-καροτένιο. Τα ευρήματα αυτά σε συνδυασμό με την υψηλή συγκέντρωση πηκτίνης που βρέθηκε στο ΣΥΧΛ (μέχρι και 4,5% w/w) αναδεικνύουν την αξία του υπολείμματος χυμοποίησης για περαιτέρω μελέτη ως πρώτη ύλη για την ανάκτηση βιοδραστικών συστατικών με ιδιαίτερο ενδιαφέρον για την βιομηχανία τροφίμων.

Ευχαριστίες: "Μέρος αυτής της εργασίας υλοποιήθηκε κάνοντας χρήση εξοπλισμού που αποκτήθηκε στο πλαίσιο της πράξης «Αναβάθμιση του φυτικού πλούτου - PlantUp» / Υποέργο 3: «Αξιοποίηση φυσικών προϊόντων της ελληνικής βιοποικιλότητας» (MIS 5002803) που εντάσσεται στη Δράση «Ενίσχυση των Υποδομών Έρευνας και Καινοτομίας» και χρηματοδοτείται από το Επιχειρησιακό Πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία» στο πλαίσιο του ΕΣΠΑ 2014-2020, με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης (Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης)"

Χαρακτηρισμός της χημικής σύστασης αλεύρων από προνύμφες και νύμφες *Hermetia illucens* (L.) (Diptera: Stratiomyidae) (black soldier fly) διαφορετικής φυλής

Στέλλα Σαρηβασιλείου, Άνθια Ματσακίδου, Αδαμαντίνη Παρασκευοπούλου
Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
ssarivas@chem.auth.gr, matsakidou@chem.auth.gr, adparask@chem.auth.gr

Το *Hermetia illucens* (L.) (Diptera: Stratiomyidae) (black soldier fly) είναι ένα από τα επτά είδη εντόμων, η χρησιμοποίηση των πρωτεϊνών των οποίων σε ζωοτροφές έχει πρόσφατα εγκριθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Κανονισμός 893/2017). Αντικείμενο της παρούσας εργασίας, ήταν ο χαρακτηρισμός της χημικής σύστασης των νυμφών και προνυμφών διαφορετικών στελεχών του συγκεκριμένου είδους. Πιο συγκεκριμένα, μελετήθηκαν η προνύμφη της ελληνικής και της πορτογαλικής φυλής και η νύμφη της πορτογαλικής φυλής, καθώς και το σιτηρέσιο με το οποίο εκτράφηκαν.

Για τη μελέτη της χημικής σύστασης, προηγήθηκε ξήρανση των δειγμάτων με τη μέθοδο της κρουοξήρανσης και άλεση για την παραλαβή τους με τη μορφή αλεύρου. Στη συνέχεια, προσδιορίστηκε η περιεκτικότητά τους σε τέφρα, πρωτεΐνη, λίπος, υγρασία, χιτίνη και τέλος, τα λιπαρά οξέα που περιέχονται σε κάθε δείγμα. Τα αποτελέσματα εκφράστηκαν ως % (w/w) ξηρής μάζας. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα που προέκυψαν, και τα δύο είδη προνυμφών (ελληνικής και πορτογαλικής φυλής) εμφάνισαν παρόμοια περιεκτικότητα σε πρωτεΐνες (~45 %) σημαντικά υψηλότερη από αυτή των νυμφών (~37,5 %). Επίσης, οι προνύμφες της πορτογαλικής φυλής ήταν περισσότερο πλούσιες σε λίπος (~27%) και χιτίνη (~10 %), ενώ οι ελληνικές σε υγρασία (~6%) και τέφρα (~5,9%). Οι νύμφες εμφάνισαν τη μεγαλύτερη περιεκτικότητα σε χιτίνη (~13 %) από όλα τα δείγματα και τη μικρότερη σε πρωτεΐνη και τέφρα. Επιπλέον, σύμφωνα με τα αποτελέσματα της αεριοχρωματογραφικής ανάλυσης των μεθυλεστέρων των λιπαρών οξέων, το λίπος των δειγμάτων περιείχε σε μεγαλύτερο ποσοστό κορεσμένα λιπαρά οξέα (12:0,14:0,16:0) και ακόρεστα με 18 άτομα άνθρακα (18:1, 18:2, 18:3). Τέλος, η μελέτη της σύστασης του πτητικού κλάσματος των δειγμάτων έδειξε την παρουσία μονοκαρβονικών οξέων, εστέρων, υδρογονανθράκων και αλδεϋδών, με κυριότερα το δεκανοϊκό και δωδεκανοϊκό οξύ και τους αντίστοιχους αιθυλεστέρες τους.

Η παρούσα εργασία χρηματοδοτήθηκε από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Καινοτομίας (ΓΓΕΚ), με αρ. Σύμβασης Έργου 30.

Θεωρητική μελέτη στην αέρια φάση της ικανότητας φυσικών διυδροξυ – και τριυδροξυ - βενζοϊκών οξέων να δεσμεύουν ελεύθερες ρίζες με απόδοση ατόμου υδρογόνου

Νεφέλη Πετρίδη, Νικόλαος Νενάδης

Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας ΑΠΘ, 541 24, Θεσσαλονίκη
e-mail: nefi133@hotmail.com, niknen@chem.auth.gr

Στην παρούσα εργασία εφαρμόζοντας τη θεωρία του συναρτησιακού παράγοντα πυκνότητας (DFT) και την υβριδική συνάρτηση B3LYP σε αέρια φάση εξετάστηκε η αντιοξειδωτική δράση φυσικών διυδροξυ και τριυδροξυ βενζοϊκών οξέων. Οι ενώσεις που επιλέχθηκαν φέρουν δυο ή τρεις υδροξυ ομάδες σε *ο*- ή *π*- θέση καθώς η παρουσία τουλάχιστο δυο τέτοιων ομάδων σε αυτού του τύπου την υποκατάσταση οδηγούν σε ισχυρή αντιοξειδωτική δράση σύμφωνα με την υπάρχουσα γνώση. Η συμβολή της παρουσίας του καρβοξυλίου εξετάστηκε με συγκριτική μελέτη των αντίστοιχων φαινολών. Η εξέταση εστίασε στη μελέτη του μηχανισμού ικανότητας απόδοσης ατόμου υδρογόνου που αποτελεί έναν από τους κύριους μηχανισμούς δέσμευσης των ελευθέρων ριζών από τα πρωτοταγή αντιοξειδωτικά. Για το σκοπό αυτό υπολογίστηκαν οι τιμές της ενθαλπίας διάσπασης του δεσμού -O-H των φαινολικών υδροξυ ομάδων. Τα θεωρητικά ευρήματα συζητούνται με βάση τις αρχές της σχέσης δομής-αντιοξειδωτικής δράσης, αλλά και σε συνδυασμό με τα περιορισμένα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα.

Επιστημονικές και κοινωνικές προκλήσεις στον αγροδιατροφικό τομέα την εποχή της πανδημίας COVID-19 με τη ματιά των μ/κων φοιτητών της ειδίκευσης 'Χημεία, Τεχνολογία και Έλεγχος Τροφίμων Και Ζωοτροφών' (Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ)

Ομάδα Εργασίας: Ευάγγελος Β. Βασιλείου, χημικός ΑΠΘ, Γεώργιος Σ. Ιωάννου χημικός ΑΠΘ, Νεφέλη Κ. Πετρίδη, Χημικός ΑΠΘ, Ελπίδα Β. Σφαιροπούλου, Γεωπόνος-Επιστ. Τροφίμων ΑΠΘ

Μέντορες: Νικόλαος Νενάδης, Επικ. Καθηγητής Μαρία Ζ. Τσιμίδου, καθηγήτρια
Εργαστήριο Χημείας & Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, 54124, Θεσσαλονίκη
e-mail: tsimidou@chem.auth.gr; nenadis@chem.auth.gr

Ο αγροδιατροφικός τομέας αποτελεί κλάδο μείζονος σημασίας για την οικονομία των περισσότερων χωρών και είναι, αναμφισβήτητα, ένας από τους σημαντικότερους παραγωγικούς τομείς της Ελλάδας. Στην παρουσίαση εκφράζονται προβληματισμοί και σκέψεις σχετικά με το που βαδίζει ο αγροδιατροφικός τομέας στην Ελλάδα του σήμερα. Η ελληνική πολιτεία ακολουθώντας τις τάσεις που επικρατούν στον αγροδιατροφικό τομέα σε παγκόσμιο επίπεδο, και σε μια προσπάθεια συμμόρφωσης με τους παγκόσμιους στόχους της βιώσιμης ανάπτυξης αναπτύσσει πολιτικές και υιοθετεί μέτρα προς αυτήν την κατεύθυνση. Όμως, η πρωτόγνωρη υγειονομική κρίση, που προκλήθηκε από το ξέσπασμα της πανδημίας COVID-19 και η οποία συνοδεύεται από ισχυρή οικονομική ύφεση δεν θα μπορούσε να αφήσει ανεπηρέαστο τον κλάδο της αγροδιατροφής και της βιομηχανίας. Η πορεία του κλάδου στην μετά-COVID εποχή αλλά και οι γνώσεις και δεξιότητες που θα χρειαστούν ως εφόδια όλοι οι εμπλεκόμενοι στην αγροδιατροφική αλυσίδα απασχολούν τους διεθνείς φορείς που ειδικεύονται σε σχετικά θέματα. Έτσι παρουσιάζονται συνεχώς σενάρια για την επόμενη μέρα και η σχετική βιβλιογραφία αυξάνεται ραγδαία. Η ομάδα εργασίας άντλησε υλικό και ιδέες τόσο από τις πρόσφατες δράσεις του οργανισμού ISEKI Food Association –με έντονη δραστηριότητα για το περιεχόμενο και τις ανάγκες της εκπαίδευσης των επιστημόνων του αγροδιατροφικού τομέα- όσο και από δράσεις που παρουσιάστηκαν πρόσφατα από το πανεπιστήμιο Wageningen της Ολλανδίας, που είναι μία χώρα πρωτοπόρος στον αγροδιατροφικό τομέα. Εξετάζοντας διάφορα πιθανά σενάρια, εστιάσαμε την προσοχή μας σε εκείνο που θεωρήσαμε ενδιαφέρον για την περίπτωση της Ελλάδας. Το σενάριο "Together in the region" που θα παρουσιασθεί αναφέρεται στην αναπροσαρμογή του τρόπου ζωής μας και σε μία στροφή προς την ενίσχυση των συστημάτων τροφίμων των τοπικών κοινοτήτων. Ως παράδειγμα τοπικής κοινότητας επιλέχθηκε η Περιφέρεια Κεντρικής Μακεδονίας, που αποτελεί μια από τις μεγαλύτερες περιφέρειες της Ελλάδας με μεγάλη δυναμική τόσο στον ερευνητικό, όσο και στο συγκεκριμένο παραγωγικό τομέα. Παρουσιάζονται στοιχεία για τις τρέχουσες πολιτικές, στόχους και προτεραιότητες της ΠΚΜ και εκφράζονται σκέψεις και προβληματισμοί για τις αναδυόμενες ανάγκες και τάσεις στην μετά COVID-19 εποχή. Έμφαση δίνεται στις γνώσεις και δεξιότητες που αναμένεται ότι θα χρειασθούν οι νέοι επιστήμονες και οι νέοι αγρότες και επαγγελματίες του κλάδου

Παρακολούθηση του ρυθμού λέπτυνσης κυρτών υγρών υμενίων ως δείκτη για την αξιολόγηση της σταθερότητας αφρών

Ζαμάνης Θ. Άγγελος, Κώστογλου Μαργαρίτης, Καραπάντσιος Δ. Θεόδωρος
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημείας, Τομές Χημικής Τεχνολογίας
e-mail: agzamanis@yahoo.gr, azamanis@chem.auth.gr

Οι αφροί κατέχουν έναν σημαντικό ρόλο στον σύγχρονο κόσμο τόσο στην καθημερινή ζωή του ανθρώπου, όσο και στον βιομηχανικό κλάδο. Οι αφροί εντοπίζονται σε πολλά προϊόντα όπως τρόφιμα, καλλυντικά, πυροσβεστήρες κ.α, αλλά και σε πολλές διεργασίες όπως η επίπλευση, η εξαγωγή πετρελαίου, η οινοποίηση και η ζυθοποίηση. Η παρουσία αφρού σε κάποια προϊόντα ή διεργασίες μπορεί να είναι επιθυμητή, καθώς ένας σταθερός αφρός μπορεί να δώσει υπεραξία σε κάποια προϊόντα, αλλά και ανεπιθύμητη καθώς ένας σταθερός αφρός π.χ. σε μια δεξαμενή μπορεί να είναι επιζήμια. Βάση όλων αυτών ο προσδιορισμός της σταθερότητας ενός αφρού είναι ιδιαίτερα σημαντικός. Η σταθερότητα ενός αφρού εξαρτάται από τη σταθερότητα των υγρών υμενίων ανάμεσα στις φυσαλίδες του αφρού. Η παρακολούθηση της σταθερότητας αυτών των υμενίων είναι ιδιαίτερα δύσκολη λόγω της κυρτής τους γεωμετρίας με μεταβλητό μήκος και πάχος. Στην παρούσα μελέτη, η τοποθέτηση μιας φυσαλίδας αέρα εντός μικρής κατακόρυφης γέφυρας υγρού επιτρέπει τη δημιουργία κυρτού υμενίου υγρού με μεταβλητό μήκος και πάχος ανάμεσα στη φυσαλίδα και τον περιβάλλοντα αέρα, αντίστοιχου των υμενίων ανάμεσα στις φυσαλίδες ενός αφρού. Κατά την ελεγχόμενη αποστράγγιση του υγρού της γέφυρας, μεταβάλλεται το μήκος και το πάχος του υμενίου προκαλώντας αρχικά την λέπτυνση και τελικά τη διάρρηξη του. Με την εφαρμογή μετρήσεων ηλεκτρικής εμπέδησης κατά μήκος της γέφυρας υγρού, καθίσταται εφικτός ο προσδιορισμός του ρυθμού λέπτυνσης του υμενίου ο οποίος χαρακτηρίζει τη σταθερότητα του υμενίου. Ειδικότερα, σε πειράματα που πραγματοποιήθηκαν με γέφυρες υγρών διαλυμάτων διαφορετικών συγκεντρώσεων επιφανειοδραστικών ουσιών όπως SDS και Ethylan 1008, σε σταθερές συνθήκες υγρασίας και θερμοκρασίας, και για διαφορετικούς ρυθμούς αποστράγγισης υγρού βρέθηκε πως όσο υψηλότερη είναι η συγκέντρωση του επιφανειοδραστικού τόσο μεγαλύτερη είναι η διάρκεια λέπτυνσης του υμενίου μέχρι την διάρρηξη του και επομένως τόσο μεγαλύτερη είναι και η σταθερότητα του αφρού.

Σχεδιασμός στήλης επίπλευσης εξοπλισμένης με γεννήτρια μικροφουσαλίδων για ανάκτηση λεπτών σωματιδίων μαγνησίτη

Τσαβέ Π. Κ*, Κώστογλου Μ., Καραπάντσιος Θ. Δ., Λαζαρίδης Ν. Κ.

Εργαστήριο Χημικής και Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

e-mail: tsavpoly@chem.auth.gr

Η τεχνική της επίπλευσης αποτελεί μία από τις κυριότερες τεχνικές διαχωρισμού ορυκτών και βασίζεται στη διαφορά των επιφανειακών ιδιοτήτων ανάμεσα στο πολύτιμο μέταλλευμα και το στείρο υλικό. Η απαραίτητη προϋπόθεση είναι τα προς διαχωρισμό υλικά να είναι υδρόφοβα. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούνται οι συλλέκτες που είναι επιφανειοδραστικές ουσίες για να καταστήσουν τα σωματίδια υδρόφοβα. Συνεπώς τα υδρόφοβα συστατικά ενός αιωρήματος που βρίσκονται διεσπαρμένα σε νερό προσκολλώνται σε φουσαλίδες αερίου και έτσι η σχετική πυκνότητα των δημιουργούμενων συσσωματωμάτων φουσαλίδας-στερεού καθίσταται μικρότερη από την αντίστοιχη του υγρού, με αποτέλεσμα να επιπλέει στην επιφάνεια, από όπου και απομακρύνεται.

Η επίπλευση των λεπτών (45-100 μm) και υπέρλεπτων (< 20 μm) σωματιδίων ορυκτών θεωρείται μία από τις σημαντικότερες τεχνικές προκλήσεις στον τομέα της επεξεργασίας ορυκτών. Ο σημαντικότερος λόγος της μειωμένης ανάκτησης λεπτών σωματιδίων με τη τεχνική της επίπλευσης είναι η χαμηλή αποτελεσματικότητα της σύγκρουσης τους με τις φουσαλίδες, οδηγώντας σε σημαντικές απώλειες (20-30%). Σύμφωνα με πολλά πειραματικά στοιχεία που προκύπτουν από ανασκόπηση της βιβλιογραφίας, η επίπλευση των λεπτών σωματιδίων μπορεί να βελτιωθεί με δύο τρόπους: 1) είτε αυξάνοντας το φαινόμενο μέγεθος των σωματιδίων και 2) είτε μειώνοντας το μέγεθος των φουσαλίδων. Η καλύτερη πρακτική προσέγγιση για την αύξηση της ανάκτησης των λεπτών σωματιδίων είναι ο συνδυασμός συμβατικών φουσαλίδων (> 500 μm) αέρα και μικροφουσαλίδων (< 100 μm).

Στην παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε σχεδιασμός, κατασκευή και λειτουργία υβριδικής στήλης επίπλευσης εργαστηριακής κλίμακας διεσπαρμένου αέρα μέσω πορώδους διαφράγματος, εξοπλισμένη με γεννήτρια μικροφουσαλίδων (από ηλεκτρόλυση νερού) για την επίπλευση λεπτών αιωρούμενων σωματιδίων μαγνησίτη. Με τη μέθοδο αυτή προτείνεται ένα αποτελεσματικό μοντέλο προσκόλλησης δύο σταδίων: i) προσρόφηση μικροφουσαλίδων καλυμμένων με μόρια αφριστικού/συλλέκτη στα σωματίδια του ορυκτού και ii) προσκόλληση των σχηματιζόμενων συσσωματωμάτων σωματιδίων/μικροφουσαλίδων στις ανερχόμενες φουσαλίδες μεγαλύτερου μεγέθους. Με τον τρόπο αυτό παρατηρείται αυξημένη απόδοση προσκόλλησης μεταξύ συμβατικών φουσαλίδων και σωματιδίων επικαλυμμένων με μικροφουσαλίδες.

Τα μέχρι στιγμής αποτελέσματα από πειράματα που διεξήχθησαν στην υβριδική στήλη επίπλευσης (παρουσία ανιονικού συλλέκτη και pH 10) έδειξαν ότι η επίπλευση των λεπτών σωματιδίων μαγνησίτη (-24 μm) ενισχύεται περίπου 10% παρουσία μικρών φουσαλίδων που προκύπτουν από την ηλεκτρόλυση του νερού, καθώς αυτές δρουν ως γέφυρες αυξάνοντας την απόδοσης σύγκρουσης των φουσαλίδων-σωματιδίων.

Απομάκρυνση χρωμικών ιόντων από υδατικά διαλύματα με χρήση πυριτίας τροποποιημένης με πολυαιθυλενιμίνη

Μαρία Ξανθοπούλου*, Δημήτρης Γκιλιόπουλος, Κωνσταντίνος Τριανταφυλλίδης, Ιωάννης Κατσογιάννης

*Εργαστήριο Χημικής και Περιβαλλοντικής Τεχνολογίας, Τμήμα Χημείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα*
e-mail: mariaxanth@chem.auth.gr

Το εξασθενές χρώμιο, Cr (VI), ένας από τους πιο τοξικούς ρύπους, απελευθερώνεται στο περιβάλλον μέσω διαφόρων ανθρωπογενών δραστηριοτήτων. Η έκθεση του Cr (VI) μπορεί να αποτελέσει σοβαρή απειλή για τη δημόσια υγεία, καθώς και για τη χλωρίδα και την πανίδα. Βρίσκεται στο περιβάλλον τόσο ως τρισθενές, Cr (III), όσο και ως εξασθενές, Cr (VI), αν και η τοξικότητα της εξασθενούς μορφής είναι μεγαλύτερη σε σχέση με την τρισθενή μορφή. Η ύπαρξη των διαφόρων ειδών του χρωμίου, που υπάρχουν στα υδατικά διαλύματα, εξαρτάται από το pH του διαλύματος. Οι επιβλαβείς επιδράσεις του χρωμίου είναι κυρίως λόγω της κινητικότητάς του στο περιβάλλον καθώς και της ικανότητας του οξειδωσης άλλων ειδών. Ως εκ τούτου, η Ευρωπαϊκή Ένωση έχει θεσπίσει όριο 50 μg/L για το χρώμιο στο πόσιμο νερό. Η προσρόφηση είναι μια θεμελιώδης και οικονομικά βιώσιμη διαδικασία για την απομάκρυνση του Cr (VI) από τα νερά και τα λύματα λόγω των πλεονεκτημάτων όπως η υψηλή απόδοση απομάκρυνσης, η χαμηλή απαίτηση σε ενέργεια, η μικρή χρήση χημικών αντιδραστηρίων, καθώς και η επαναχρησιμοποίηση του προσροφητικού μέσου. Η προσρόφηση του Cr (VI) από τα υδατικά διαλύματα στην επιφάνεια του προσροφητικού υλικού συμβαίνει λόγω ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης ή μέσω χημικής αντίδρασης. Η παρούσα εργασία μελετά την προσρόφηση των χρωμικών οξυανιόντων, από υδατικά διαλύματα, χρησιμοποιώντας σωματίδια πυριτίας τροποποιημένης με πολυαιθυλενιμίνη. Η πολυαιθυ-λενιμίνη (PEI) είναι ένα πολυμερές με υψηλό κατιονικό φορτίο. Μπορεί εύκολα να δεσμεύσει τα αρνητικά φορτισμένα χρωμικά ιόντα λόγω της ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης μεταξύ PEI και χρωμικών ιόντων. Μελετήθηκαν οι παράμετροι που επηρεάζουν τη διεργασία της προσρόφησης όπως το pH, η αρχική συγκέντρωση χρωμικών ιόντων και η δόση του προσροφητικού υλικού. Η απομάκρυνση του χρωμίου φαίνεται να είναι αρκετά αποτελεσματική ιδιαίτερα για τις σχετικά χαμηλές συγκεντρώσεις χρωμικών ιόντων.

Καταλυτική μετατροπή λιγνίνης προς παραγωγή φαινολικών και αρωματικών ενώσεων

Ζορμπά Φ.¹, Μαργέλλου Α.¹, Τριανταφυλλίδης Κ.^{1,2}

¹Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη

²Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών & Ενέργειας Πόρων, ΕΚΕΤΑ, 57001 Θεσσαλονίκη

e-mail: foteinifz@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η επερχόμενη εξάντληση των ορυκτών πόρων οδήγησε στην ανάγκη εύρεσης εναλλακτικών πηγών ενέργειας και πρώτων υλών. Μία πολλά υποσχόμενη οικονομική, ανανεώσιμη πρώτη ύλη είναι η βιομάζα, και πιο συγκεκριμένα, η λιγνοκυτταρινούχα. Η λιγνίνη, ένα από τα τρία βασικά συστατικά της λιγνοκυτταρινούχας βιομάζας, βρίσκεται σε αφθονία στην φύση και μέχρι σήμερα χρησιμοποιείται μόνο ως ένα χαμηλής ενεργειακής αξίας καύσιμο. Η αποδόμηση της λιγνίνης, μέσω καταλυτικών αντιδράσεων σχάσης των δεσμών της, οδηγεί στον σχηματισμό μονομερών και ολιγομερών μονάδων. Έπειτα, αυτά τα προϊόντα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως πρόσθετα ή για την παραγωγή βιο-πολυμερών και χημικών. Στην εργασία αυτή παρουσιάζεται η διεργασία της καταλυτικής υδρογονόλυσης της λιγνίνης προς φαινολικές ενώσεις χαμηλού μοριακού βάρους. Πιο συγκεκριμένα, μελετήθηκαν η Organosoln και η Kraft λιγνίνη, η οποία αποτελεί παραπροϊόν της βιομηχανίας πολτού κυτταρίνης και παραγωγής χαρτιού. Η υδρογονόλυση της λιγνίνης λαμβάνει χώρα σε σχετικά ήπιες συνθήκες (< 300°C, πίεση υδρογόνου < 50 bar) και με την χρήση νερού ή φιλικών/πράσινων οργανικών διαλυτών, όπως π.χ. αιθανόλη, ισοπροπανόλη, κ.α., οι οποίοι εκτός από διαλύτες της διεργασίας μπορούν να δράσουν ταυτόχρονα και ως «δότες υδρογόνου». Επιπλέον, η παρουσία μεταλλικών καταλυτών με δράση υδρογόνωσης προωθεί περαιτέρω τις αντιδράσεις υδρογονόλυσης των ολιγομερών της λιγνίνης προς μονομερείς/διμερείς φαινολικές ενώσεις, όπως αλκυλο- και αλκοξυ-φαινόλες. Στην παρούσα εργασία μελετήθηκαν καταλύτες ρουθηνίου (Ru) υποστηριγμένου σε μικρο/μεσοπορώδεις ενεργούς άνθρακες, οι οποίοι οδήγησαν στην αποτελεσματική παραγωγή βιο-ελαίων λιγνίνης πλούσιων σε οξυγονούχες φαινολικές ενώσεις. Τα βιοέλαια αυτά μπορούν να αξιοποιηθούν ως πηγή φαινολικών μονομερών για την παραγωγή πολυμερών (π.χ. ρητινών φαινόλης-φορμαλδεΐδης, εποξειδικών ρητινών, κ.α.) ή να μετατραπούν περαιτέρω μέσω διεργασιών υδρογονοαποξυγόνωσης προς παραγωγή υδρογονανθράκων/καυσίμων.

Τεχνο-οικονομική ανάλυση και εκτίμηση βιωσιμότητας αξιοποίησης της λιγνίνης μέσω (καταλυτικής) πυρόλυσης προς χημικές ενώσεις υψηλής προστιθέμενης αξίας

Ιακώβου Γ.¹, Τριανταφυλλίδης Κ.^{1,2}

¹Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη

²Ινστιτούτο Χημικών Διεργασιών & Ενέργειας Πόρων, ΕΚΕΤΑ, 57001 Θεσσαλονίκη

e-mail: iakovou@chem.auth.gr

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η σύγκριση διαφορετικών μεθόδων αξιοποίησης τεχνικής (παραγόμενης από βιομηχανικές διεργασίες-κυρίως στην χαρτοβιομηχανία) λιγνίνης και η διερεύνηση της τεχνο-οικονομικής βιωσιμότητας αξιοποίησης της ως πρώτη ύλη για την παραγωγή χημικών ενώσεων υψηλής προστιθέμενης αξίας (ΧΕΥΠΑ). Μέχρι σήμερα η αξιοποίηση της τεχνικής λιγνίνης γίνεται με καύση της για την κάλυψη των ενεργειακών αναγκών της βιομηχανικής μονάδας. Η πυρόλυση θεωρείται ως μια πολλά υποσχόμενη κατεργασία διάσπασης της λιγνίνης σε χρήσιμα μονομερή¹ και μπορεί να πραγματοποιηθεί θερμικά ή καταλυτικά. Όπως έχει δείχθει^{2,3} μέσω της καταλυτικής πυρόλυσης της λιγνίνης παράγεται βιο-έλαιο που περιέχει πλήθος ΧΕΥΠΑ όπως όπως φαινόλη, τολουόλιο, βενζόλιο κ.α. Στην εργασία πραγματοποιήθηκε τεχνο-οικονομική μελέτη για πρότυπη μονάδα αξιοποίησης της λιγνίνης Kraft που παράγεται από τη χαρτοβιομηχανία με την χρήση πυρόλυσης (θερμική και καταλυτική) και για διαφορετικές μεθόδους διαχωρισμού του παραγόμενου από την πυρόλυση βιο-ελαίου (απόσταξη, χρωματογραφία στήλης, εκχύλιση). Επιπλέον, διερευνήθηκε το σενάριο καύσης των προϊόντων της πυρόλυσης ως μέθοδος αναφοράς. Η μονάδα, δυναμικότητας επεξεργασίας 32 kt λιγνίνης τον χρόνο, προσομοιώθηκε με τη χρήση του Aspen Plus από όπου και εξήχθησαν τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας για όλα τα στάδια της διεργασίας. Η οικονομική ανάλυση βασίστηκε στην εκτίμηση του κόστους πάγιου κεφαλαίου της επένδυσης και του κόστους παραγωγής καθώς και της απόδοσης της επένδυσης (ROI) που αποτελεί τον βασικό δείκτη αποτίμησης της αξίας επένδυσης. Ο υπολογισμός των εσόδων βασίστηκε στις τιμές πώλησης των παραγόμενων προϊόντων όπως βρέθηκαν στην αγορά. Η διάρκεια ζωής της μονάδας ορίστηκε στα 20 χρόνια με ένα εύρος αρχικής επένδυσης από 32 έως 290 εκατομμύρια ευρώ. Οι αντίστοιχοι ROI κυμάνθηκαν από 11% έως και 340%, που αποδίδεται στις υψηλές τιμές πώλησης των ΧΕΥΠΑ. Η εργασία δείχνει την δυνητικά επικερδή επένδυση σε μια μονάδα αξιοποίησης της λιγνίνης με πυρόλυση, ειδικά ως προσάρτηση της σε υπάρχουσα χαρτοβιομηχανία όπου η τεχνική λιγνίνη είναι το βασικό «απόβλητο».

Βιβλιογραφία

- (1) Alper, K. et al. Pyrolysis of Agricultural Residues for Bio-Oil Production. *Clean Techn Environ Policy* 2015, 17 (1), 211–223. <https://doi.org/10.1007/s10098-014-0778-8>.
- (2) Lazaridis, P. A. et al. Catalytic Fast Pyrolysis of Kraft Lignin With Conventional, Mesoporous and Nanosized ZSM-5 Zeolite for the Production of Alkyl-Phenols and Aromatics. *Front. Chem.* 2018, 6. <https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00295>.
- (3) Charisteidis, I. et al. Catalytic Fast Pyrolysis of Lignin Isolated by Hybrid Organosolv—Steam Explosion Pretreatment of Hardwood and Softwood Biomass for the Production of Phenolics and Aromatics. *Catalysts* 2019, 9, 935. <https://doi.org/10.3390/catal9110935>.

Χαρακτηρισμός και αξιοποίηση βιομάζας μικροφυκών για την παραγωγή βιοκαυσίμων

Καβούκης Σ.¹, Τριανταφυλλίδης Κ.^{1,2}

¹ Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη

² Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), ΑΠΘ, Balkan Center, 10^ο χλμ Θεσ/νίκης-Θέρμης, Τ.Θ. 8318, Τ.Κ. 57001 Θεσσαλονίκη

e-mail: ktrianta@chem.auth.gr, skavoukis@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η έρευνα και τεχνολογία έχει στρέψει τα τελευταία χρόνια την προσοχή της σε νέες πηγές ανανεώσιμων πρώτων υλών. Σήμερα τα περισσότερα προϊόντα και μορφές ενέργειας προέρχονται από τη βιομηχανία πετροχημικών. Στην πραγματικότητα, το διαθέσιμο απόθεμα ορυκτών καυσίμων είναι χαμηλό, επομένως είναι θεμελιώδους σημασίας να βρεθούν νέοι πόροι πρώτων υλών, προκειμένου να καλυφθούν οι παγκόσμιες ανάγκες. Τα μικροφύκη είναι μία αξιόπιστη πηγή προϊόντων προστιθέμενης αξίας, καθώς παρουσιάζουν συγκριτικά πλεονεκτήματα σε σχέση με άλλες πρώτες ύλες (π.χ. συμβατικές καλλιέργειες), όπως υψηλούς ρυθμούς ανάπτυξης και μικρό περιβαλλοντικό αποτύπωμα, δεδομένου ότι χρησιμοποιούν το CO₂ ως πηγή άνθρακα και τον ήλιο ως πηγή ενέργειας για την ανάπτυξη της βιομάζας, ακόμη και σε υποβαθμισμένα και ρυπασμένα νερά. Επιπλέον, τα μικροφύκη παράγουν υψηλό ποσοστό του ατμοσφαιρικού O₂ και περιέχουν πολυσακχαρίτες, εγκεκριμένους για ανθρώπινη κατανάλωση. Ανάλογα με το στέλεχος μικροφυκών και τις συνθήκες ανάπτυξής του, είναι δυνατή η παραγωγή βιομάζας εμπλουτισμένης σε λιπίδια, πρωτεΐνες, χρωστικές και υδατάνθρακες.

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε πειραματικά η διαδικασία εκχύλισης των λιπιδίων από το γένος μικροφυκών *Chlorella vulgaris*. Πραγματοποιήθηκε βασικός φυσικοχημικός χαρακτηρισμός της αρχικής βιομάζας και ειδικότερα μελετήθηκε η επίδραση του αρχικού ποσοστού των λιπιδίων και του συστήματος διαλυτών στην απόδοση σε ελαιώδη φάση (ως % κ.β. επί της αρχικής μάζας των μικροφυκών). Το προφίλ των ελεύθερων λιπαρών οξέων που προέκυψαν από τα τριγλυκερίδια μελετήθηκε με τη μέθοδο της αέριας χρωματογραφίας [1]. Τα πειράματα χαρακτηρισμού των μικροφυκών και απομόνωσης των λιπιδίων, συνοδεύτηκαν και από εκτεταμένη βιβλιογραφική ανασκόπηση στο γενικότερο πεδίο των μικροφυκών από την καλλιέργεια τους μέχρι και την ενεργειακή αξιοποίηση της βιομάζας τους, με αναφορά σε σημαντικά στάδια, όπως την ανάπτυξη των καλλιεργειών, τη συγκομιδή και το προφίλ των θρεπτικών συστατικών για το στέλεχος *Chlorella vulgaris*.

Ευχαριστίες: προς το Διαβαλκανικό Κέντρο Περιβάλλοντος (<http://www.i-bec.org/>) και τον Καθ. κ. Γ. Ζαλίδη (Τμήμα Γεωπονίας ΑΠΘ) και την ομάδα του για την παροχή των δειγμάτων *Chlorella vulgaris*.

Βιβλιογραφία:

[1] Adamakis, I.-D. et al. Cultivation, characterization, and properties of *Chlorella vulgaris* microalgae with different lipid contents and effect on fast pyrolysis oil composition. *Environmental Science and Pollution Research* 25, 23018-23032, doi:10.1007/s11356-018-2368-5 (2018).

**ΜΕΡΟΣ ΙΙ. ΠΕΡΙΛΗΨΕΙΣ ΑΝΑΡΤΗΜΕΝΩΝ
ΑΝΑΚΟΙΝΩΣΕΩΝ**

ΠΟ-1. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό και την ποσοτικοποίηση 34 δραστικών ουσιών για παθήσεις του κεντρικού νευρικού συστήματος, σε ξηρά κηλίδα αίματος, με υγρή χρωματογραφία υπερυψηλής απόδοσης αντίστροφης φάσης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας σε σειρά (UPLC-MS/MS).

Βασιλική Αβραάμ^{1,2}, Αμβρόσιος Ορφανίδης^{2,3}, Γεώργιος Θεοδωρίδης^{1,2}, Ελένη Γκίκα^{2,3}, Αναστασία-Στέλλα Ζώτου¹

¹ Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

² BIOMIC_AUTH, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ-ΑΠΘ), Balkan Center, 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

³ Εργαστήριο Ιατροδικαστικής και Τοξικολογίας, Σχολή Επιστημών Υγείας, Τμήμα Ιατρικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

Η παρακολούθηση της συγκέντρωσης δραστικών ουσιών για παθήσεις του κεντρικού νευρικού συστήματος στο αίμα έχει μεγάλη σημασία στην τοξικολογία και στην κλινική ιατρική, καθώς οι ενώσεις αυτές έχουν μικρά θεραπευτικά όρια. Επίσης, η δειγματοληψία ξηράς κηλίδας αίματος είναι λιγότερο επεμβατική σε σχέση με την λήψη αίματος με σύριγγα, επομένως περισσότερο επιθυμητή, και με σωστή καθοδήγηση μπορεί να γίνει και από τον ίδιο τον ασθενή ανά πάσα στιγμή. Στην παρούσα μελέτη, αναπτύχθηκε μια μέθοδος χρωματογραφίας υπερυψηλής απόδοσης αντίστροφης φάσης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας (UPLC-MS/MS) με στόχο την εφαρμογή της σε δείγματα ξηράς κηλίδας αίματος ασθενών. Οι ενώσεις που μελετήθηκαν είναι οι εξής: 7-άμινο-φλουνιτραζεπάμη, αγομελατίνη, αλοπεριδόλη, αλπραζολάμη, αμισουλπρίδη, αμιτρυπτιλίνη, βενλαφαξίνη, βιπεριδίνη, βουπροπιόνη, βρωμαζεπάμη, διαζεπάμη, ζολπιδέμη, καρβαμαζεπίνη, κλοζαπίνη, κλομιπραμίνη, κουετιαπίνη, λεβομεπρομαζίνη, λοραζεπάμη, μιρταζαπίνη, μοκλοβεμίδη, νορδιαζεπάμη, ολανζαπίνη, οξαζεπάμη, παροξετίνη, ρισπεριδόνη, σερτινδόλη, σετραλίνη, σιταλοπράμη, τεμαζεπάμη, φαινυτοΐνη, φλουνιτραζεπάμη, φλουοξετίνη, χλωροδιαζεποξείδη και χλωροπρομαζίνη. Η ανάπτυξη της μεθόδου πραγματοποιήθηκε σε χρωματογραφία Waters Acquity H-Class και φασματογράφο μαζών Sciex 3200 System. Η παρακολούθηση των παραπάνω ενώσεων και του εσωτερικού προτύπου τους, έγινε με βάση την ανίχνευση των φορτισμένων ιόντων [M+H]⁺ σε λειτουργία θετικού ιονισμού με ηλεκτροψεκασμό. Για κάθε ένωση ξεχωριστά, βρέθηκαν οι βέλτιστοι παράμετροι προσδιορισμού τους στον φασματογράφο μάζας, ύστερα από απευθείας έγχυση σε αυτόν. Ο χρωματογραφικός διαχωρισμός πραγματοποιήθηκε σε στήλη Acquity UPLC BEH C18 (1.7 μm, 150 mm × 2.1 mm i.d.) με κινητές φάσεις A: νερό, 0.1% HCOOH και B: μεθανόλη, 0.1% HCOOH. Η προκατεργασία των δειγμάτων πραγματοποιήθηκε με εμβάπτιση της ξηράς κηλίδας αίματος σε διαλύτη εκχύλισης, παραλαβή του εκχυλίσματος, εξάτμιση μέχρι ξηρού και ανασύσταση με κινητή φάση. Η επικύρωση της μεθόδου πραγματοποιήθηκε με τη μελέτη των ορίων ανίχνευσης (LOD) και ποσοτικού προσδιορισμού (LOQ), τα εύρη γραμμικότητας, την ακρίβεια, την επίδραση του υποστρώματος, την ανάκτηση, την πιστότητα και τη σταθερότητα κάθε ένωσης στην ξηρά κηλίδα.

ΠΟ-2. Αυτόματος φθορισμομετρικός προσδιορισμός της ιστιδίνης σε δείγματα ούρων με την τεχνική των διαδοχικών εγχύσεων (ZF)

Αντώνιος Αλευρίδης¹, Αποστολία Τσιασιώτη¹,

Κωνσταντίνος Ζαχαράς², Παρασκευάς Τζαναβάρας¹

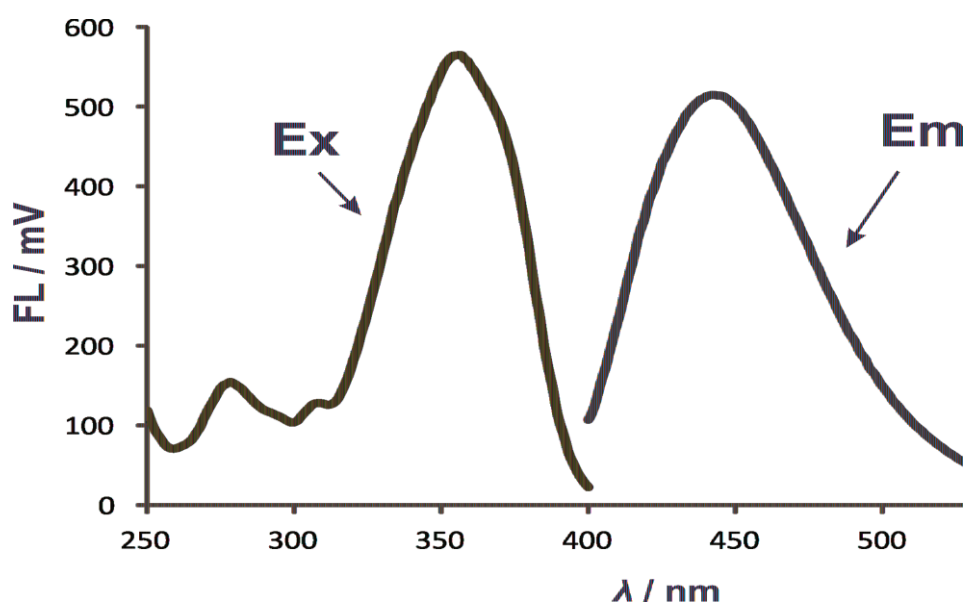
¹Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, antalenium@gmail.com, ptzanava@chem.auth.gr

² Τμήμα Φαρμακευτικής, Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

Στην εργασία αυτή περιγράφεται η ανάπτυξη, επικύρωση και εφαρμογή μιας νέας, αυτόματης μεθόδου για τον προσδιορισμό της ιστιδίνης. Το προσδιοριζόμενο συστατικό αντιδρά ταχύτατα με την ο-φθαλαδεΰδη (OPA) υπό ήπιες αλκαλικές συνθήκες (pH = 7,5) προς σχηματισμό ισχυρά φθορίζοντος παραγώγου (lex/lem = 360/440 nm). Η αντίδραση αυτοματοποιήθηκε σε συνθήκες ροής μέσω της τεχνικής των Διαδοχικών Εγχύσεων (Zone Fluidics).

Η μέθοδος βελτιστοποιήθηκε ως προς τις χημικές και οργανολογικές παραμέτρους, ενώ επικυρώθηκε δίνοντας ιδιαίτερη βαρύτητα στην ευαισθησία και στην εκλεκτικότητα. Το όριο ανίχνευσης που επιτεύχθηκε ήταν 31 nmol L⁻¹, ενώ η επαναληψιμότητα ήταν < 1% κατά τη διάρκεια της ίδιας ημέρας και < 5% κατά τη διάρκεια διαφορετικών ημερών (n = 6).

Αναλύθηκαν με επιτυχία δείγματα ούρων ενήλικων εθελοντών, με τα επίπεδα της ιστιδίνης να κυμαίνονται μεταξύ 116 και 1527 μmol L⁻¹ και τις εκατοστιαίες ανακτήσεις να κυμαίνονται μεταξύ 87,6 και 95,4%.



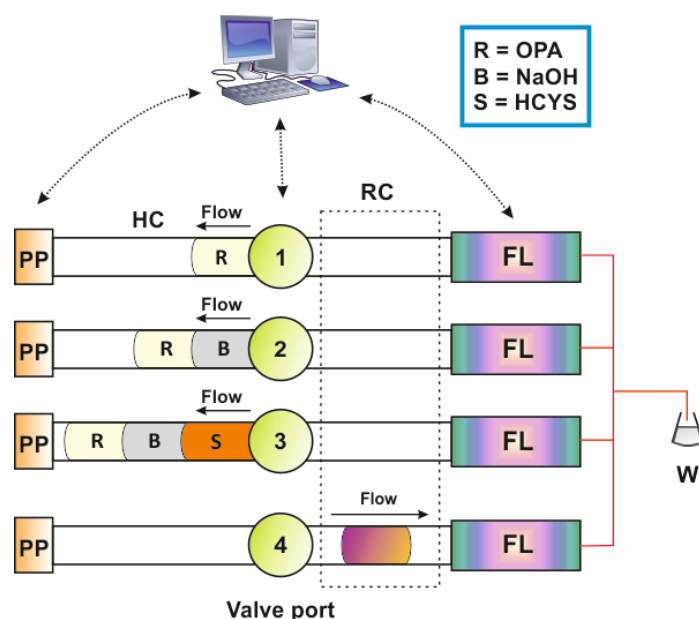
Σχήμα 1. Φάσμα διέγερσης (Ex) και εκπομπής (Em) του προϊόντος της αντίδρασης παραγωγοποίησης μεταξύ της ιστιδίνης και της ο-φθαλαδεΰδης.

ΠΟ-3. Εν-ροή αντίδραση της ομοκουστεΐνης με την ο-φθαλαδεΐδη σε ισχυρά αλκαλικό περιβάλλον: φθορισμομετρικός προσδιορισμός με την τεχνική των διαδοχικών εγχύσεων (ZF)

Αικατερίνη Ανδρέου, Αποστολία Τσιασιώτη, Παρασκευάς Τζαναβάρας
Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
kath.andreou.24@gmail.com, ptzanava@chem.auth.gr

Στην παρούσα εργασία περιγράφεται η μελέτη της αντίδρασης μεταξύ της ομοκουστεΐνης και της ο-φθαλαδεΐδης σε συνθήκες ροής. Η ομοκουστεΐνη αντιδρά με το αντιδραστήριο παραγωγοποίησης σε ισχυρά αλκαλικό περιβάλλον απουσία λοιπών πυρηνόφιλων ενώσεων προς σχηματισμό ισχυρά φθορίζοντος παραγώγου ($\lambda_{ex} / \lambda_{em} = 370/480 \text{ nm}$). Οι παράμετροι της αντίδρασης μελετήθηκαν με την τεχνική των διαδοχικών εγχύσεων (Zone Fluidics – ZF). Η εκλεκτικότητα της αντίδρασης έναντι ενώσεων με παρόμοια δομή μελετήθηκε σε περίπτωση των πιθανών παρεμποδίσεων (10:1).

Τα ευρήματα της μελέτης αποτέλεσαν τη βάση για την ανάπτυξη μιας αυτόματης μεθόδου για τον προσδιορισμό της ομοκουστεΐνης. Η μέθοδος ήταν γραμμική σε εύρος συγκεντρώσεων $100 - 1500 \text{ nmol L}^{-1}$ με όριο ανίχνευσης (LOD) 20 nmol L^{-1} . Η επαναληψιμότητα (RSD) ήταν $< 0,5\%$ (εντός της ημέρας) και $3,2\%$ (μεταξύ ημερών). Η προτεινόμενη μέθοδος ήταν ταχεία (24 εγχύσεις ανά ώρα) και ακριβής για τον προκαταρκτικό προσδιορισμό της ομοκουστεΐνης σε υπόστρωμα συνθετικών ούρων.



Σχήμα 1. Διάταξη ZF για τον προσδιορισμό της ομοκουστεΐνης.

ΠΟ-4. Δημιουργία in house βιβλιοθήκης HPLC χρωματογραφημάτων και QTOF-MS φασμάτων με τη χρήση πρότυπων ενώσεων της εταιρείας Merck

Διαμαντίδου Δ.^{α,γ}, Καδέμογλου Κ.^{α,γ}, Μπούτου Ε.^{α,γ}, Βιργιλίου Χ.^{α,γ}, Γκίκα Ε.^{β,γ},
Θεοδωρίδης Γ.^{α,γ}

^α *Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 541 24 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα*

^β *Εργαστήριο Ιατροδικαστικής και Τοξικολογίας, Τμήμα Ιατρικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 541 24 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα*

^γ *Biomic AUTH, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), Balkan Center
B1.4, 10ο χλμ Θεσσαλονίκης -Θέρμης 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα*

e-mail: ddiamanti@chem.auth.gr, kkademoglou@chem.auth.gr, boutou.eleftheria@gmail.com,
cr_virgi@hotmail.com, gakikae@auth.gr, gtheodor@chem.auth.gr

Η θέσπιση μιας «in house» βιβλιοθήκης φασμάτων σε ένα αναλυτικό εργαστήριο κρίνεται απαραίτητη, καθώς καθημερινά προκύπτει η ανάγκη για την ταυτοποίηση των ενώσεων που εμπιρεύονται σε ένα πολύπλοκο υπόστρωμα (βιολογικό δείγμα, τρόφιμο κ.ο.κ). Μια ανάλογη βιβλιοθήκη λοιπόν θα πρέπει να παρέχει πληροφορίες σχετικές με τον χρόνο συγκράτησης των ενώσεων, αλλά και των θυγατρικών ιόντων και θραυσμάτων, που προκύπτουν έπειτα από τον ιονισμό και τη θραυσματοποίησή τους.

Στην εργασία αυτή, δημιουργήθηκε μια in-house βιβλιοθήκη φασμάτων, η οποία περιλαμβάνει έναν μεγάλο αριθμό μεταβολιτών (>900) που εμπίπτουν σε διαφορετικές κατηγορίες χημικών ενώσεων (οργανικά οξέα, υδατάνθρακες, λιπαρά οξέα, αμινοξέα κ.α), με τη χρήση της υγρής χρωματογραφίας υψηλής πίεσης-φασματομετρίας μαζών και αναλυτή χρόνου πτήσης (UHPLC-TOF-MS). Τις ενώσεις αυτές προμήθευσε στο εργαστήριό μας η εταιρεία Merck, και ένα μέρος αυτών αποτελεί κομμάτι της εμπορικά διαθέσιμης βιβλιοθήκης MS MLS, ενώ οι υπόλοιπες περιλαμβάνουν μόρια τα οποία δεν είναι ακόμη εμπορικά διαθέσιμα από την εταιρεία σε kit πλακών των 96-θέσεων. Η χημική ανάλυση των μεταβολιτών έλαβε χώρα έπειτα από τη διαλυτοποίησή τους και την προετοιμασία τους σε μείγματα των 12 ενώσεων, σε συνολικά 5 διαφορετικές χρωματογραφικές στήλες, 3 αντίστροφης φάσης και 2 κανονικής φάσης (C18, C8, RP Amide, OH5 HILIC και zic HILIC), με ανίχνευση σε θετικό και αρνητικό ιονισμό. Έπειτα από την ολοκλήρωση των χημικών αναλύσεων ακολούθησε η εύρεση της χρωματογραφικής κορυφής για την κάθε ένωση, η συλλογή των χρόνων συγκράτησης για κάθε στήλη και τον ιόντων των μεταβολιτών (κύριων και θυγατρικών ιόντων και θραυσμάτων) και η οργάνωση της πληροφορίας σε κατάλληλα διαμορφωμένους πίνακες. Οι πίνακες αυτοί εισήχθησαν σε ειδικό λογισμικό για τη δημιουργία βιβλιοθήκης φασμάτων. Η βιβλιοθήκη χρησιμοποιείται κατά την ανάλυση πραγματικών δειγμάτων για την ταυτοποίηση ενώσεων του δείγματος.

ΠΟ-5. Ανάπτυξη χρωματογραφικών μεθόδων για τη μελέτη της αυθεντικότητας των ξηρών καρπών σε συνδυασμό με χημειομετρικά εργαλεία

Νατάσα Καλογιούρη^{1,*}, Πέτρος Μησικάρης², Αθανάσιος Παπαδόπουλος²,
Βικτωρία Σαμανίδου¹

¹ Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη

² Εργαστήριο Χημικής Βιολογίας, Τμήμα Επιστημών Διατροφής και Διαιτολογίας, Διεθνές
Πανεπιστήμιο της Ελλάδος, Σίνδος, 57400, Θεσσαλονίκη

Οι ξηροί καρποί κατέχουν εξέχουσα θέση στη διατροφή του ανθρώπου, λόγω της υψηλής περιεκτικότητάς τους σε βιοδραστικές ουσίες, όπως είναι οι φαινόλες και οι τοκοφερόλες. Οι ενώσεις αυτές έχουν συνδεθεί με τη γεωγραφική προέλευση των τροφίμων και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως δείκτες σε μελέτες αυθεντικότητας. Καθίσταται, λοιπόν, σαφές ότι είναι επιτακτική η ανάγκη για την ανάπτυξη αναλυτικών μεθόδων για τον προσδιορισμό βιοδραστικών ουσιών σε ξηρούς καρπούς. Για τον σκοπό αυτό, αναπτύχθηκαν και επικυρώθηκαν μέθοδοι υγρής χρωματογραφίας υψηλής απόδοσης με ανιχνευτή υπεριώδους φωτός (HPLC-UV) για τον προσδιορισμό φαινολικών ενώσεων και τοκοφερολών σε καρύδια, φουντούκια, φυστίκια και αμύγδαλα που προέρχονται από την Ελλάδα και το εξωτερικό. Για την προκατεργασία των ξηρών καρπών και την παραλαβή των φαινολικών ενώσεων, τα δείγματα ομογενοποιήθηκαν και στη συνέχεια, ζυγίστηκε 0,5 g δείγματος και εκχυλίστηκε με 1 mL μίγματος ακετονιτριλίου:νερού (60:40, v/v). Το εκχύλισμα παραλήφθηκε και ακολούθησε έγχυση του διηθημένου δείγματος στο χρωματογραφικό σύστημα και ανάλυση με HPLC-UV. Για την παραλαβή των τοκοφερολών από τα έλαια των ξηρών καρπών, 1 g ομογενοποιημένου δείγματος εκχυλίστηκε με 10 mL εξάνιο σε υδατόλουτρο υπερήχων στους 40 °C, ακολούθησε φυγοκέντρηση σε 8,000 rpm για 10 min. Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκε παραλαβή του εκχυλίσματος και ακολούθησε εξάτμιση υπό κενό σε περιστροφικό εξάτμιστή για την παραλαβή του ελαίου. Τελικά, 10 mg ελαίου διαλυτοποιήθηκαν σε 0,5 mL ισοπροπανόλη και ακολούθησε ανάλυση με HPLC-UV. Τα ποσοτικά αποτελέσματα που προέκυψαν από τις αναλύσεις χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη χημειομετρικών μοντέλων πρόβλεψης της γεωγραφικής προέλευσης των δειγμάτων.

Η παρούσα έρευνα συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση Μεταδιδασκτών ερευνητών/ερευνητριών - Β΄ Κύκλος» (MIS-5033021), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ), με κωδικό υποτροφίας 2019-050-0503-17749.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

Επιχειρησιακό Πρόγραμμα
Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού,
Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2014-2020
ανάπτυξη - εργασία - αλληλεγγύη

ΠΟ-6. Ανάπτυξη ηλεκτροχημικού αισθητήρα ανίχνευσης βιοδεικτών της νόσου με οσμή των ούρων σαν σιρόπι σφενδάμου (MSUD) σε μορφοποιημένα ηλεκτρόδια πάστας άνθρακα με σαφράν συζευγμένο με νανοσωματίδια αργύρου

Σοφία Καραστογιάννη*, Στέλλα Γηρούση

Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Θεσσαλονίκη

e-mail: skarastogianni@hotmail.com, girousi@chem.auth.gr

Η παρούσα εργασία περιγράφει τη σύνθεση και το χαρακτηρισμό μεταλλικών νανοσωματιδίων αργύρου που προκύπτουν με τη βοήθεια της φυσικής χρωστικής σαφράν. Τα προτεινόμενα συζευγμένα με νανοσωματίδια αργύρου ηλεκτροπολυμερίστηκαν με τη χρήση κυκλικής βολταμετρίας μορφοποιώντας την επιφάνεια του ηλεκτροδίου πάστας άνθρακα. Η ηλεκτροχημική συμπεριφορά των μορφοποιημένων ηλεκτροδίων πραγματοποιήθηκε με κυκλική βολταμετρία (CV). Η μορφολογία του αισθητήρα χαρακτηρίστηκε με τη βοήθεια της μικροσκοπίας ηλεκτρονικής σάρωσης (SEM). Τα προτεινόμενα χρησιμοποιήθηκαν στην ανάπτυξη ηλεκτροχημικών αισθητήρων ανίχνευσης βιοδεικτών (L-διακλαδισμένα αμινοξέα) της νόσου με οσμή των ούρων σαν σιρόπι σφενδάμου (MSUD), προσδιορίζοντας τα αναλυτικά χαρακτηριστικά της προτεινόμενης μεθόδου ανίχνευσης.

Λέξεις-κλειδιά: ηλεκτροπολυμερισμός, νανοσωματίδια αργύρου, σαφράν, ηλεκτροχημικοί αισθητήρες

Βιβλιογραφία

- [1] Song, Y.; Xu, C.; Kuroki, H.; Liao, Y.; Tsunoda, M. J. Pharm. Biomed. Anal. 2018, 147, 35–49.
- [2] Karastogianni, S.; Girousi S. Appl. Sci. 2020, 10, 7023.
- [3] Liu, Y.; Liang, Y.; Yang, R.; Li, J.; Qu, L. Talanta 2019, 195, 691–698.
- [4] Lai, G.; Zhang, H.; Yong, J.; Yu, A. Biosen. Bioelectr. 2013, 47, 178–183.
- [5] García-Carmona, L.; González, M.C.; Escarpa, A. Electroanalysis 2018, 30, 1505–1510.
- [6] Karastogianni, S.; Girousi, S. Int. J. Cur. Res. 2017, 9, 61118–61124.

ΠΟ-7. Μεταβολομική ανάλυση νευρικών προγονικών κυττάρων μετά από επίδραση με κοκαΐνη

Αδαμάντιος Κρόκος¹, Όλγα Δέδα², Ευαγγελία Κεσίδου³, Νικολέτα Δεληβάνογλου³, Μαρίνα Μποζίκη³, Νικόλαος Γρηγοριάδης³, Χριστίνα Βιργιλίου¹, Νικόλαος Ράικος², Ελένη Γκίκα², Γεώργιος Θεοδωρίδης¹

¹ Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ.

akrokosa@chem.auth.gr, cvirgiliou@auth.gr, gtheodor@chem.auth.gr

² Εργαστήριο Ιατροδικαστικής και Τοξικολογίας, Ιατρική Σχολή Α.Π.Θ.,

oliadmy@gmail.com, raikos@auth.gr, gkikae@auth.gr

³ Εργαστήριο Πειραματικής Νευρολογίας και Νευροανοσολογίας, Β' Νευρολογική Πανεπιστημιακή Κλινική Α.Π.Θ., ΠΓΝΘ ΑΧΕΠΑ,

bioevangelia@yahoo.gr, ndelivan@gmail.com, bozikim@auth.gr, ngrigoriadis@auth.gr

Η κοκαΐνη (βενζοϋλομεθυλεκγονίνη) είναι κρυσταλλικό τροπανιοειδές, ισχυρά εθιστικό με διεγερτική δράση. Υπάρχουν διάφορες μελέτες που εστιάζουν στις αρνητικές επιπτώσεις της χρήσης κοκαΐνης στην υγεία.

Η παρούσα εργασία στοχεύει στην *in-vitro* μελέτη κυτταροτοξικότητας της κοκαΐνης σε κυτταρικές σειρές νευρικών προγονικών κυττάρων, εγκεφάλου νεογνών μυών και στην εύρεση των μεταβολικών και των σχετιζόμενων μεταβολικών μονοπατιών που επηρεάζονται υπό την επίδραση της, για την διερεύνηση του μηχανισμού δράσης της. Για το σκοπό αυτό, προσδιορίστηκε πειραματικά η θανατηφόρα συγκέντρωση της κοκαΐνης, χρησιμοποιώντας ΧΤΤ Cell Proliferation Assay Kit, σε διαφορετικές συγκεντρώσεις επίδρασης από 0,5 mM έως 5 mM. Στη συνέχεια μελετήθηκε η κυτταροτοξική δράση της κοκαΐνης στην εκτιμώμενη LC₅₀ σε τρεις διαφορετικούς χρόνους επίδρασης (3h, 24h και 48h μετά). Το μεταβολικό αποτύπωμα της δράσης της μελετήθηκε σε δείγματα μέσου καλλιέργειας και ενδοκυττάρου υλικού με την εφαρμογή στοχευμένης μεθόδου υγρής χρωματογραφίας υδρόφιλων αλληλεπιδράσεων σε σύζευξη με φασματομετρία μάζας για τον προσδιορισμό 100 μικρών πολικών μεταβολιτών.

Στο ενδοκυττάριο υγρό ανιχνεύθηκαν 25 και 55 μεταβολίτες στο θρεπτικό μέσο. Στη συνέχεια πραγματοποιήθηκε μονοπαραμετρική και πολυπαραμετρική στατιστική ανάλυση με τη χρήση των λογισμικών MS Excel και SIMCA 13.0 (Umetrics). Η εκτίμηση των μοντέλων PCA, PLS-DA και OPLS-DA και των τιμών p-value, VIP, AUC-ROC, log₂FC, ανέδειξε στατιστικά ισχυρή διαφοροποίηση 11 μεταβολιτών στο ενδοκυττάριο και 23 στο θρεπτικό μέσο, με την υποξανθίνη, αδενίνη και χολίνη να διαφοροποιούνται και στα δύο υποστρώματα.

Χρηματοδότηση-Ευχαριστίες

«Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας» (MIS-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (IKY)»

ΠΟ-8. Ανάπτυξη μεθόδου μικροεκχύλισης στερεάς φάσης υπερκείμενου χώρου σε συνδυασμό με αέρια χρωματογραφία συζευγμένη με φασματομετρία μάζας (HS-SPME-GC-MS) για τη μη στοχευμένη ανάλυση πτητικών ενώσεων του ελαιόλαδου

Άρτεμις Λιούπη^{1,2*}, Βασιλική Παπώτη³, Κυριακή Ζηνοβιάδου³ Χριστίνα Βιργιλίου^{1,2}, Ιωάννης Σαμψωνίδης^{1,2}, Απόστολος Σπύρος⁴, Γεώργιος Θεοδωρίδης^{1,2}

¹Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

²Biotic AUTH, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ ΑΠΘ), 10^ο χλμ Θεσ/νίκης-Θέρμης, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

³Perrotis College, Αμερικάνικη Γεωργική Σχολή, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

⁴Εργαστήριο NMR, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Κρήτης, 71003, Ηράκλειο Κρήτης, Ελλάδα

* email: liouarte@chem.auth.gr

Η μεταβολομική βρίσκει εφαρμογή στην αντιμετώπιση σύγχρονων προκλήσεων που σχετίζονται με την ποιότητα και την ασφάλεια των τροφίμων. Στο πλαίσιο αυτό, η ανάπτυξη πολυδύναμων αναλυτικών μεθόδων είναι υψίστης σημασίας για τη διασφάλιση της αυθεντικότητας και την ανάδειξη των ποιοτικών χαρακτηριστικών των παραγόμενων Ελληνικών προϊόντων διατροφής. Το προφίλ των πτητικών ενώσεων του ελαιόλαδου δίνει σημαντικές πληροφορίες για τα ποιοτικά χαρακτηριστικά του προϊόντος. Στην παρούσα μελέτη, αναπτύχθηκε μια μη στοχευμένη μέθοδος μεταβολομικής, βασισμένη στην τεχνική της αέριας χρωματογραφίας συζευγμένης με φασματομετρία μάζας (GC-MS), για την ανάλυση των πτητικών ενώσεων του ελαιόλαδου. Η παραλαβή των πτητικών συστατικών από την υπερκείμενη αέρια φάση πραγματοποιείται με την τεχνική της μικροεκχύλισης στερεάς φάσης (HS-SPME). Για την εύρεση των βέλτιστων συνθηκών της τεχνικής μικροεκχύλισης στερεάς φάσης πραγματοποιήθηκε σχεδιασμός πειραμάτων (DoE). Μελετήθηκαν η ποσότητα και η ανάδευση του δείγματος, καθώς και οι συνθήκες προσρόφησης και εκρόφησης των πτητικών συστατικών από την ίνα. Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόστηκε για την ανάλυση δειγμάτων ελαιόλαδου (n=63), συμβατικά και βιολογικά, από διαφορετικές περιοχές της Κρήτης και δίνει τη δυνατότητα ανίχνευσης μεγάλου αριθμού μεταβολιτών (>90). Η παρούσα μέθοδος, με συνδυαστική χρήση χημειομετρικών μοντέλων και στατιστικής ανάλυσης, αποτελεί ένα σημαντικό εργαλείο για την αξιολόγηση της αυθεντικότητας και την ανάδειξη των ποιοτικών χαρακτηριστικών του ελαιόλαδου.

Η εργασία αυτή υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Πράξης «FoodOmicsGR “Ένδελεχής Χαρακτηρισμός Τροφίμων”» (MIS 5029057) που εντάσσεται στη Δράση «Ενίσχυση των Υποδομών Έρευνας και Καινοτομίας» και χρηματοδοτείται από το Επιχειρησιακό Πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία» στο πλαίσιο του ΕΣΠΑ 2014-2020, με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης (Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης).

ΠΟ-9. Ανάπτυξη μεθόδου αέριας χρωματογραφίας-φασματομετρίας μαζών έπειτα από εκχύλιση των συστατικών με την τεχνική μικροεκχύλισης στερεάς φάσης για την ανάλυση πτητικών ενώσεων επιτραπέζιας ελιάς. Μελέτη της πορείας ζύμωσης επιτραπέζιων ελιών Χαλκιδικής.

Άρτεμις Λιούπη^{1,2}, Κυριακή Ζηνοβιάδου³, Δημήτριος Ψαθάς³, Βασιλική Παπώτη³
Χριστίνα Βιργιλίου^{1,2}, Γεώργιος Θεοδωρίδης^{*1,2}

¹Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

²Biotic AUTH, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ ΑΠΘ), 10ο χλμ Θεσ/νίκης-Θέρμης, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

³Perrotis College, Αμερικάνικη Γεωργική Σχολή, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

*email: liouarte@chem.auth.gr

Οι επιτραπέζιες ελιές ανήκουν στα σημαντικότερα παγκοσμίως προϊόντα ζύμωσης και η διαδικασία αυτή που λαμβάνει χώρα συνεισφέρει στο χαρακτηριστικό άρωμά τους. Πολύ λίγα δεδομένα είναι γνωστά για το άρωμα των φυσικώς ζυμούμενων ελιών σε άλμη, ενώ οι ελιές Χαλκιδικής αποτελούν ένα προϊόν με ιδιαίτερα οργανοληπτικά χαρακτηριστικά. Στην παρούσα μελέτη, αναπτύχθηκε μια μέθοδος αέριας χρωματογραφίας συζευγμένης με φασματομετρία μαζών (GC-MS) για την ανάλυση του πτητικού προφίλ επιτραπέζιων ελιών. Η προκατεργασία του δείγματος πραγματοποιείται με την τεχνική μικροεκχύλισης στερεάς φάσης (HS-SPME). Οι παράμετροι που μελετήθηκαν και βελτιστοποιήθηκαν είναι ο χρόνος και η θερμοκρασία εκχύλισης, ο όγκος και το pH του δείγματος, η ποσότητα και σύσταση της άλμης. Η μέθοδος εφαρμόστηκε σε ελιές ποικιλίας Χαλκιδικής οι οποίες συλλέχθηκαν από δύο διαφορετικές περιοχές της Βόρειας Ελλάδας και υποβλήθηκαν σε διαφορετικούς τρόπους ζύμωσης (ελιές φυσικές, ισπανικού τύπου, χαρακτές και παραδοσιακές). Στη συνέχεια, μελετήθηκε η επίδραση των διαφορετικών ζυμώσεων στο μεταβολικό προφίλ και έγιναν δειγματοληψίες σε επτά διαφορετικά χρονικά σημεία ώστε να αξιολογηθεί η πορεία της ζύμωσης. Τα τελικά προϊόντα υποβλήθηκαν στις απαραίτητες μικροβιολογικές (ολική μεσόφιλη χλωρίδα, ζύμες-μύκητες, οξυγαλακτικά βακτήρια) και φυσικοχημικές (pH, αλατότητα, ενεργότητα νερού, σκληρότητα, χρώμα, υγρασία) αναλύσεις. Από την ανάλυση του πτητικού προφίλ βρέθηκαν σημαντικές διαφοροποιήσεις μεταξύ δειγμάτων που είχαν υποβληθεί σε διαφορετικές διαδικασίες ζύμωσης.

Η εργασία αυτή υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Πράξης «FoodOmicsGR “Ενδεδειγμένος Χαρακτηρισμός Τροφίμων”» (MIS 5029057) που εντάσσεται στη Δράση «Ενίσχυση των Υποδομών Έρευνας και Καινοτομίας» και χρηματοδοτείται από το Επιχειρησιακό Πρόγραμμα «Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα και Καινοτομία» στο πλαίσιο του ΕΣΠΑ 2014-2020, με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης (Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης).

ΠΟ-10. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου προσδιορισμού έξι β-αναστολέων σε ορό αίματος και σε δείγματα ούρων με UHPLC-MS/MS, μετά από εκχύλιση FPSE

Κωνσταντίνα Μαζαράκη¹, Abuzar Kabir², Kenneth G. Furton², Κωνσταντίνος Φυτιάνος³, Βικτώρια Φ. Σαμανίδου⁴, Κωνσταντίνος Κ. Ζαχαρής¹

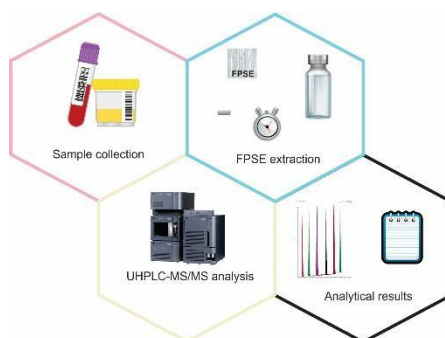
¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, ΑΠΘ
e-mail: konstantinamazarakis@outlook.com, czacharis@pharm.auth.gr

²Διεθνές Ινστιτούτο Ιατροδικαστικής Έρευνας, Τμήμα Χημείας και Βιοχημείας, Πανεπιστήμιο Φλόριντα, Μαϊάμι, Φλόριντα, ΗΠΑ

³Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ

⁴Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ

Η παρούσα εργασία διαπραγματεύεται τη χρήση ενός νέου υλικού, τροποποιημένου με ομάδες πολυαιθυλενογλυκόλης (Carbowax 20W), για την εκχύλιση και απομόνωση έξι β-αναστολέων (β-blockers) από ανθρώπινο ορό αίματος και ούρων. Το υπόστρωμα κυτταρίνης τροποποιήθηκε με υβριδικό ανόργανο-οργανικό προσροφητικό sol-gel και χαρακτηρίστηκε με φασματοσκοπία υπερέυθρων μετασχηματισμού Fourier (FTIR) και μικροσκοπία σάρωσης ηλεκτρονίων (SEM). Λόγω των χαρακτηριστικών ιδιοτήτων του υλικού, η εκχύλιση επιτεύχθηκε σε σχετικά σύντομο χρονικό διάστημα (15 λεπτά), ενώ η μεγάλη διαπερατότητά του επέτρεψε την άμεση εκχύλιση βιολογικών δειγμάτων χωρίς καμία περαιτέρω προκατεργασία. Η εκχύλιση FPSE (fabric phase sorptive extraction) χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό των ενώσεων ατενολόλη, ναδολόλη, μετοπρολόλη, οξπρενολόλη, λαμπεταλόλη και προπρανολόλη σε βιολογικά υποστρώματα σε συνδυασμό με UHPLC-ESI-MS/MS. Μετά την επιλογή του κατάλληλου υλικού (Carbowax 20M), οι παράμετροι που επηρεάζουν την απόδοση της εκχύλισης (χρόνος εκχύλισης, όγκος του δείγματος, μέγεθος του υλικού, ο διαλύτης έκλουσης κλπ.) μελετήθηκαν και βελτιστοποιήθηκαν. Ο προσδιορισμός των ενώσεων έγινε χρησιμοποιώντας τη λειτουργία παρακολούθησης πολλαπλής αντίδρασης (MRM) με θετικό ιονισμό με ηλεκτροψεκασμό. Η γραμμικότητα της μεθόδου μελετήθηκε στο εύρος 50-5000 ng mL⁻¹ και κατασκευάστηκαν καμπύλες αναφοράς με συντελεστή βαρύτητας (1/X). Η ακρίβεια της μεθόδου εντός της ίδιας ημέρας και μεταξύ διαφορετικών ημερών κυμάνθηκε από -17,2 έως 13,3% και -10,8 έως 12,6%, αντίστοιχα. Η επαναληψιμότητα εντός της ίδιας ημέρας και μεταξύ διαφορετικών ημερών ήταν μικρότερη από 11,5 και 14,5%, αντίστοιχως. Η προτεινόμενη μέθοδος εφαρμόστηκε με επιτυχία για τον προσδιορισμό των συγκεκριμένων ενώσεων σε βιολογικά υποστρώματα (ορός αίματος, ούρα).



ΠΟ-11. Μέθοδος προσδιορισμού θρεπτικών και τοξικών στοιχείων σε καραμέλες και ζαχαρωτά με την τεχνική ICP-AES

N. Μανούση, Γ. Α. Ζαχαριάδης

Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ, Ελλάδα

e-mail: nmanousi@chem.auth.gr, zacharia@chem.auth.gr

Ο προσδιορισμός μετάλλων σε δείγματα τροφίμων είναι σημαντικός τόσο για τον έλεγχο της ασφάλειάς τους, όσο και της θρεπτικής τους αξίας. Οι καραμέλες και τα ζαχαρωτά είναι γλυκά σνακ που είναι πολύ πιθανό να καταναλωθούν από παιδιά. Στην παρούσα μελέτη πραγματοποιήθηκε ανάπτυξη και την επικύρωση μιας μεθόδου φασματομετρίας ατομικής εκπομπής επαγωγικά συζευγμένου πλάσματος (ICP-AES) για τον προσδιορισμό των στοιχείων Ag, Al, Ba, Bi, Ca, Cd, Co, Cr, Cu, Fe, In, Mg, Mn, Ni, Pb, Tl και Zn σε καραμέλες και ζαχαρωτά. Για το σκοπό αυτό εξετάστηκαν διάφορα πρωτόκολλα υγρής πέψης προκειμένου να διασφαλιστεί η ελάχιστη κατανάλωση αντιδραστηρίων και ο σύντομος χρόνος προκατεργασίας δείγματος. Υπό τις βέλτιστες συνθήκες, χρειάστηκαν λιγότερο από 10 λεπτά για την πέψη των δειγμάτων. Η μέθοδος ICP-AES επικυρώθηκε ως προς τη γραμμικότητα, την ακρίβεια, την επαναληψιμότητα, τα όρια ανίχνευσης και τα όρια ποσοτικού προσδιορισμού. Οι σχετικές ανακτήσεις για την προτεινόμενη μέθοδο κυμάνθηκαν μεταξύ 80,1% και 119,8%, δείχνοντας καλή ακρίβεια. Επιπλέον, οι τιμές σχετικής τυπικής απόκλισης ήταν χαμηλότερες από 9,1%, δείχνοντας καλή επαναληψιμότητα. Τα όρια ανίχνευσης για τις προσδιοριζόμενες ενώσεις ήταν 0,04-3,80 mg kg⁻¹ και τα όρια ποσοτικού προσδιορισμού ήταν 0,12-12,6 mg kg⁻¹. Τέλος, η προτεινόμενη μέθοδος χρησιμοποιήθηκε με επιτυχία για την ανάλυση διαφόρων τύπων ζαχαρωτών και καραμελών που υπάρχουν διαθέσιμα στην ελληνική αγοράς.

ΠΟ-12. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό και την απόλυτη ποσοτικοποίηση 15 ακυλοκαρνιτινών, σε ορό αίματος, με χρωματογραφία υδρόφιλης αλληλεπίδρασης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας σε σειρά (HILIC-MS/MS)

Θωμάς Μεϊκόπουλος^{1,2}, Θωμάη Μουσκεφτάρα^{2,3}, Όλγα Μπέγου^{1,2}, Όλγα Δέδα^{2,3}
Ελένη Γκίκα^{2,3}, Γεώργιος Θεοδωρίδης^{1,2}

¹ Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

² BIOMIC_AUTh, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ-ΑΠΘ), Balkan Center, 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

³ Εργαστήριο Ιατροδικαστικής και Τοξικολογίας, Σχολή Επιστημών Υγείας, Τμήμα Ιατρικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

Οι ακυλοκαρνιτίνες είναι μια κατηγορία μεταβολιτών με μεγάλη κλινική σημασία και αποτελούν προτεινόμενους βιοδείκτες για διάφορες ασθένειες όπως αυτή της στεφανιαίας νόσου. Στην παρούσα μελέτη, αναπτύχθηκε μια μέθοδος χρωματογραφίας υδρόφιλης αλληλεπίδρασης συζευγμένης με φασματομετρία μάζας (HILIC-MS/MS) με στόχο την εφαρμογή της σε δείγματα ορού αίματος ασθενών που συμμετέχουν στο έργο «CorLipid». Οι ενώσεις που μελετήθηκαν είναι οι εξής: C2, C3, C4, isoC4, C5, isoC5, C6, C8, C10, C12, C14, C16, C18, C18:1, C18:2. Η ανάπτυξη της μεθόδου πραγματοποιήθηκε σε χρωματογραφία Waters Acquity H-Class και φασματογράφο μαζών Waters Xevo TQD. Η παρακολούθηση των παραπάνω ενώσεων και των εσωτερικών προτύπων τους, έγινε με βάση την ανίχνευση των φορτισμένων ιόντων [M+H]⁺ σε λειτουργία θετικού ιονισμού με ηλεκτροψεκασμό. Για κάθε ένωση ξεχωριστά, βρέθηκαν οι βέλτιστες παράμετροι προσδιορισμού τους στον φασματογράφο μάζας, ύστερα από απευθείας έγχυση σε αυτόν. Ο χρωματογραφικός διαχωρισμός πραγματοποιήθηκε σε στήλη Acquity UPLC BEH HILIC column (1.7 μm, 150 mm × 2.1 mm i.d.) με κινητές φάσεις A: 95 ακετονιτρίλιο : 5 νερό (v/v), 10 mM HCOONH₄, pH = 3 και B: 30 ακετονιτρίλιο : 70 νερό (v/v), 10 mM HCOONH₄, pH = 3. Η προκατεργασία των δειγμάτων πραγματοποιήθηκε με απλή καταβύθιση πρωτεϊνών λαμβάνοντας ένα μέρος ορού με τρία μέρη ακετονιτρίλιου (1:3 v/v). Η επικύρωση της μεθόδου πραγματοποιήθηκε με τη μελέτη των ορίων ανίχνευσης (LOD) και ποσοτικού προσδιορισμού (LOQ), τα εύρη γραμμικότητας, την ακρίβεια, την επίδραση του υποστρώματος, την ανάκτηση, την πιστότητα και τη σταθερότητα κάθε ένωσης σε πρότυπα διαλύματα. Η ανάκτηση της μεθόδου κυμάνθηκε από 84,4% έως 118,7%.

Η εργασία υλοποιήθηκε στο πλαίσιο της Δράσης ΕΡΕΥΝΩ-ΔΗΜΙΟΥΡΓΩ-ΚΑΙΝΟΤΟΜΩ συγχρηματοδοτήθηκε από το Ευρωπαϊκό Ταμείο Περιφερειακής Ανάπτυξης (ΕΤΠΑ) της Ευρωπαϊκής Ένωσης και εθνικούς πόρους μέσω του Ε.Π. Ανταγωνιστικότητα, Επιχειρηματικότητα & Καινοτομία (ΕΠΑνΕΚ) (κωδικός έργου:Τ1ΕΔΚ-04005)

ΠΟ-13. Ανάπτυξη μεθόδου για τον προσδιορισμό οργανικών οξέων σε ούρα με GC-MS/MS

Θωμάη Μουσκεφτάρα^{1,2}, Χριστίνα Βιργιλίου^{2,3}, Γεώργιος Θεοδωρίδης^{2,3}, Ελένη Γκίκα^{1,2}

¹. Τμήμα Ιατρικής, Σχολή Επιστημών Υγείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

². Biomic A.U.Th, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), Balkan Center B1.4, 10ο χλμ Θεσσαλονίκης -Θέρμης 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

³. Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

Τα οργανικά οξέα (ΟΑ) αποτελούνται από μονο-, δι- τρικαρβοξυλικά οξέα ή και οξέα με φαινολικές ομάδες και απαντώνται συνήθως ως ενδιάμεσα σε ενδοκυτταρικές μεταβολικές οδούς, όπως ο κύκλος του κιτρικού οξέος, η αποικοδόμηση των αμινοξέων, ο μεταβολισμός των λιπαρών οξέων, η νευροδιαβίβαση κ.α. Αρκετές μελέτες έχουν συσχετίσει τις συγκεντρώσεις των ΟΑ στα ούρα με ένα ευρύ φάσμα μεταβολικών διαταραχών. Για το λόγο αυτό αναπτύχθηκε μια γρήγορη απλή και αξιόπιστη μέθοδος για τον προσδιορισμό 52 ΟΑ στα ούρα στο πλαίσιο εφαρμογών σε κλινικές ή/και διατροφικές μελέτες αλλά και για αναλύσεις ρουτίνας. Ο προσδιορισμός των ΟΑ στα ούρα πραγματοποιήθηκε μετά από μια απλή απομάκρυνση μακρομορίων με μεθανόλη ακολουθούμενη από μεθοξυαμίνωση (μεθοξυλαμίνη 2% σε πυριδίνη) και σιλυλίωση (MSTFA 1% TMCS) χρησιμοποιώντας αναλυτική διάταξη GC-MS/MS (Bruker EVOQ 456) σε λειτουργία παρακολούθησης επιλεγμένης αντίδρασης (MRM). Αρχικά έγινε ανάπτυξη της αναλυτικής μεθόδου, με επιλογή των βέλτιστων συνθηκών και παραμέτρων στο GC-MS/MS (επιλογή δυναμικών, μητρικών ιόντων, συνθηκών διάσπασης, θυγατρικών ιόντων κλπ.). Για την επιλογή της καταλληλότερης μεθόδου προκατεργασίας δοκιμάστηκαν 3 διαφορετικά πρωτόκολλα μεταξύ των οποίων η διπλή όξινη εκχύλιση με οξικό αιθυλεστέρα/διαιθυλαιθέρα, η όξινη εκχύλιση με μεθυλοτριτο-βουτυλαιθέρα καθώς και διαφορετικά πρωτόκολλα παραγωγοποίησης με αντιδραστήρια όπως υδροχλωρική μεθοξαμίνη, MSTFA και BSTFA. Το πρωτόκολλο που επιλέχθηκε βελτιστοποιήθηκε ως προς τη θερμοκρασία και το χρόνο παραγωγοποίησης. Η μέθοδος επικυρώθηκε σύμφωνα με τις οδηγίες των EMA και FDA για τις βιοαναλυτικές μεθόδους και εφαρμόστηκε σε 20 δείγματα ούρων. Οι τιμές όλων των παραμέτρων επικύρωσης βρίσκονται εντός των αποδεκτών ορίων. Σύμφωνα με την βιβλιογραφία δεν υπάρχει πλήρως επικυρωμένη μέθοδος που να καλύπτει ένα τόσο ευρύ φάσμα ΟΑ στα ούρα χρησιμοποιώντας εξαιρετικά μικρούς όγκους ούρων, παράγωγα TMS και τεχνική GC-EI-MS/MS.

ΠΟ-14. Ανάπτυξη και επικύρωση μεθόδου για τον προσδιορισμό φαιλυλεφρίνης σε ξηρές κηλίδες αίματος, με χρωματογραφία υδρόφιλων αλληλεπιδράσεων συζευγμένη με φασματομετρία μάζας σε σειρά (HILIC-MS/MS)

Ελευθερία Μπούτου^{1,2}, Χριστίνα Βιργιλίου^{1,2}, Αικατερίνη Σεληνιωτάκη⁴, Μαρία Λιθοξοπούλου⁵, Ασημίνα Ματαυσή⁴, Νικόλαος Ράικος³, Ελένη Γκίκα^{2,3}

¹ Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

² BIOMIC_AUTh, Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ-ΑΠΘ), Balkan Center, 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

³ Εργαστήριο Ιατροδικαστικής και Τοξικολογίας, Σχολή Επιστημών Υγείας, Τμήμα Ιατρικής, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

⁴ Β' Οφθαλμολογική Κλινική, Τμήμα Ιατρικής, Σχολή Επιστημών Υγείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Γενικό Νοσοκομείο Παπαγεωργίου Θεσσαλονίκης, 56429 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

⁵ Β' Νεογνολογική Κλινική, Τμήμα Ιατρικής, Σχολή Επιστημών Υγείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Γενικό Νοσοκομείο Παπαγεωργίου Θεσσαλονίκης, 56429 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

Η φαιλυλεφρίνη είναι ένα συμπαθομιμητικό φάρμακο που όταν περάσει στην κυκλοφορία του αίματος επηρεάζει συστήματα οργάνων όπως το καρδιαγγειακό, το αναπνευστικό και το γαστρεντερικό. Χρησιμοποιείται ευρέως σε οφθαλμικά σκευάσματα καθώς προκαλεί μυδρίαση της κόρης του οφθαλμού. Στην παρούσα μελέτη, αναπτύχθηκε μια χρωματογραφική μέθοδος υδρόφιλων αλληλεπιδράσεων συζευγμένη με φασματομετρία μαζών σε σειρά (HILIC-MS/MS) με στόχο την ανίχνευση και ποσοτικοποίηση της φαιλυλεφρίνης σε δείγματα ολικού αίματος πρόωρων νεογνών, στα οποία χορηγήθηκε μέσω κολλύριου για την διάγνωση Αμφιβληστροειδοπάθειας της Προωρότητας (ΑτΠ). Η ανάπτυξη της μεθόδου πραγματοποιήθηκε σε χρωματογραφικό σύστημα Waters Acquity H-Class συζευγμένο με φασματογράφο μαζών Waters Xevo TQD. Ο προσδιορισμός της πραγματοποιήθηκε με MRM (m/z 168 → 150) σε λειτουργία θετικού ιονισμού με ηλεκτροψεκασμό. Ο χρωματογραφικός διαχωρισμός πραγματοποιήθηκε σε στήλη ACQUITY UPLC BEH AMIDE column (2.1 x 150 mm, 1.7 μm) με κινητές φάσεις A: 95 ακετονιτρίλιο : 5 νερό (v/v), 10 mM HCOONH₄, pH = 3 και B: 30 ακετονιτρίλιο : 70 νερό (v/v), 10 mM HCOONH₄, pH = 3. Εφαρμόστηκε ισοκρατικό σύστημα έκλουσης (90% A, 10% B) με διάρκεια ανάλυσης 5 λεπτά. Η ένωση παραλείφθηκε από τις ξηρές κηλίδες αίματος με εκχύλιση με κατάλληλο διαλύτη. Η μέθοδος βελτιστοποιήθηκε και επικυρώθηκε ως προς το όριο ανίχνευσης (LOD) και ποσοτικοποίησης (LOQ), γραμμικότητα, ακρίβεια, επίδραση του υποστρώματος, ανάκτηση, πιστότητα και σταθερότητα σε εμβολιασμένα δείγματα αίματος γνωστής συγκέντρωσης. Η μέθοδος κρίθηκε κατάλληλη για την εφαρμογή της σε πραγματικά δείγματα για την μελέτη της φαρμακοκινητικής της φαιλυλεφρίνης σε νεογνά.

ΠΟ-15. Ανάπτυξη ομογενούς εκχύλισης υγρού- υγρού για τον προσδιορισμό δοξορουβικίνης σε δείγματα ούρων με χρωματογραφία υγρού υπερυψηλής πίεσης με φθορισμομετρική ανίχνευση

Ιωάννα –Χρυσούλα Στρατηγού^{1,2}, Αποστολία Τσιασιώτη³, Παρασκευάς Τζαναβάρας³, Αικατερίνη Μαρκοπούλου¹, Κωνσταντίνος Φυτιάνος⁴, Κωνσταντίνος Ζαχαρίας¹

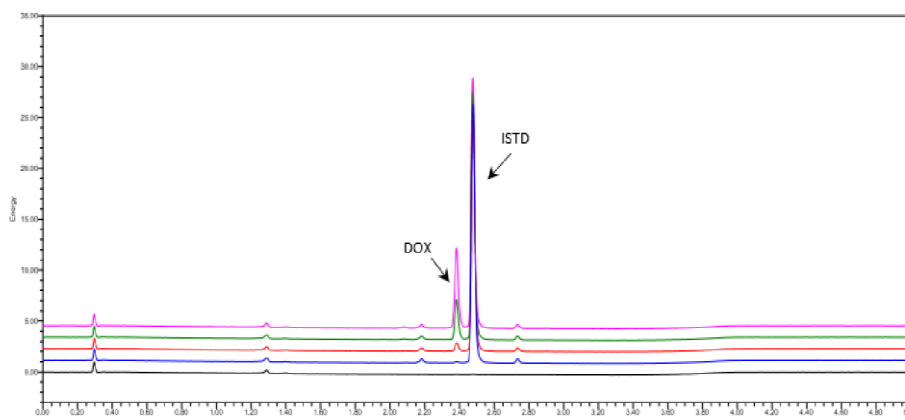
¹Εργαστήριο Φαρμακευτικής Ανάλυσης, Τμήμα Φαρμακευτικής, ΑΠΘ
iwannastr@hotmail.com (czacharis@pharm.auth.gr)

²Analytical Development Laboratory, Research and Development API operations, Pharmathen SA

³Εργαστήριο Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ,

⁴Εργαστήριο Ελέγχου Ρύπανσης Περιβάλλοντος, Τμήμα Χημείας, ΑΠΘ

Στην παρούσα εργασία, προτείνεται μια νέα αναλυτική μέθοδος για τον προσδιορισμό του αντικαρκινικού φαρμάκου – δοξορουβικίνη – σε δείγματα ανθρώπινων ούρων με UHPLC-FLD μετά από ομογενή εκχύλιση υγρού-υγρού με χρήση άλατος για διαχωρισμό των φάσεων. Το ακετονιτρίλιο χρησιμοποιήθηκε ως διαλύτης εκχύλισης, ενώ ο διαχωρισμός φάσης επιτεύχθηκε με τη χρήση υψηλής συγκέντρωσης άλατος. Η ανάλυση της δοξορουβικίνης και της επιρουβικίνης, (εσωτερικό πρότυπο) πραγματοποιήθηκε σε λιγότερο από 5 λεπτά με χρήση υγρής χρωματογραφίας υπερυψηλής πίεσης σε συνδυασμό με φθορισμομετρική ανίχνευση ($\lambda_{\text{ex}}/\lambda_{\text{em}} = 430/580 \text{ nm}$). Η μελέτη και η βελτιστοποίηση των παραμέτρων της εκχύλισης πραγματοποιήθηκε με βοήθεια πειραματικού σχεδιασμού. Για την επικύρωση της μεθόδου κατασκευάστηκαν τα «προφίλ ακριβείας» (accuracy profiles). Τα διαστήματα “ανοχής” β δεν υπερέβησαν τα όρια αποδοχής $\pm 15\%$ που σημαίνει ότι το 95% των μελλοντικών αποτελεσμάτων θα συμπεριληφθούν στα καθορισμένα όρια. Το όριο ανίχνευσης (LOD) της μεθόδου ήταν 10 ng mL^{-1} . Η ακρίβεια της μεθόδου (εκφρασμένη ως ανάκτηση) κυμάνθηκε από 94,7 - 106,3% ενώ η σχετική τυπική απόκλιση (RSD) ήταν χαμηλότερη από 5,1%. Η προτεινόμενη μέθοδος UHPLC που αναπτύχθηκε εφαρμόστηκε με επιτυχία στην ανάλυση της δοξορουβικίνης σε δείγματα ούρων από διαφορετικούς εθελοντές.



Ανάλυση «λευκού» δείγματος ούρων (μαύρο) και επιμολυσμένου με i) 4000 ng mL^{-1} εσωτερικό πρότυπο (μπλε), ii) 100 ng mL^{-1} (κόκκινο), 500 ng mL^{-1} (πράσινο) και 1000 ng mL^{-1} δοξορουβικίνη (φουξ), αντίστοιχα.

ΠΟ-16. Μελέτη της καταλυτικής οξειδωσης της 2'-δεοξυγουανοσίνης από το Mo₂C παρουσία H₂O₂

Ιωάννου Θ.¹, Καλλιτσάκης Μ.², Καλογιούρη Ν.², Τερζίδης Μ.²

¹Τμήμα Επιστημών Διατροφής και Διαιτολογίας, Σχολή Επιστημών Υγείας, ΔΙ.ΠΑ.Ε.

²Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

e-mail: mterzidis@nutr.teithe.gr

Το Mo₂C, αποδείχθηκε πρόσφατα ότι παράγει μοριακό οξυγόνο απλής κατάστασης ¹O₂ (singlet oxygen) παρουσία H₂O₂.¹ Το ¹O₂, ένα από τα δραστικά ενδιάμεσα προϊόντα του οξυγόνου (ROS), παρουσιάζει υψηλή δραστικότητα έναντι βιομορίων.² Από τη βιβλιογραφία, είναι γνωστό ότι μεταξύ των βάσεων του DNA, η 2'-δεοξυγουανοσίνη (dG) είναι επιρρεπής στη οξειδωτική δράση του ¹O₂.³

Σκοπός της παρούσας μελέτης είναι η εκτίμηση, για πρώτη φορά,⁴ του βαθμού της οξειδωτικής βλάβης της dG από την καταλυτική δράση του συστήματος Mo₂C/H₂O₂ και η συγκριτική μελέτη με την βλάβη ως αποτέλεσμα δραστικών ενδιάμεσων οξυγόνου που προκύπτουν από ευρέως χρησιμοποιούμενες αντιδράσεις τύπου Fenton, με χρήση ιόντων Fe³⁺ και Cu²⁺.

Η μελέτη στηρίχθηκε σε ποσοτικές αναλύσεις των προϊόντων οξειδωσης της dG και συγκεκριμένα της 8-οξο-7,8-διυδρο-2'-δεοξυγουανοσίνης (8-oxo-dG) και των σπιροϊμινοδιυδαντοϊνών (dSp), που αποτελούν πρωτογενές και δευτερογενή προϊόντα οξειδωσης, αντίστοιχα.

Ο προσδιορισμός των οξειδωτικών βλαβών έγινε με υγρή χρωματογραφία υψηλής πίεσης (HPLC - UV). Τα αποτελέσματα της έρευνας έδειξαν ότι το χρωματογραφικό προφίλ του μίγματος της αντίδρασης οξειδωσης της dG με το σύστημα Mo₂C/H₂O₂, εξαρτάται άμεσα από την τιμή του pH του διαλύματος της αντίδρασης, όπου σε αλκαλικές τιμές, εύρους pH 9 - 10, παράγονται τα dSp σε ποσοστό 10% ενώ η τυχόν ύπαρξη του 8-oxo-dG βρίσκεται κάτω από το όριο ανίχνευσης της μεθόδου. Επίσης, το χρωματογραφικό προφίλ των προϊόντων βρέθηκε να είναι διαφοροποιημένο συγκριτικά με αυτό των γνωστών αντιδράσεων τύπου Fenton, υποδεικνύοντας διαφορετική δραστικότητα, διαφορετικό μίγμα προϊόντων και συγκέντρωση των μορίων αυτών στο μέσο της αντίδρασης.

1. Liu, G. *et al.* Mo₂C-Derived Polyoxometalate for NIR-II Photoacoustic Imaging-Guided Chemodynamic/Photothermal Synergistic Therapy. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **58**, 18641–18646 (2019).
2. Hirakawa, K. Biomolecules Oxidation by Hydrogen Peroxide and Singlet Oxygen. *React. Oxyg. Species Living Cells* 79–81 (2018) doi:10.5772/intechopen.71465.
3. Di Mascio, P. *et al.* Singlet Molecular Oxygen Reactions with Nucleic Acids, Lipids, and Proteins. *Chem. Rev.* **119**, 2043–2086 (2019).
4. Η παρούσα μελέτη αποτελεί μέρος του έργου *PhotoDaLu*, το οποίο χρηματοδοτείται από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) και από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ), με αρ. Σύμβασης Έργου 776 και κωδικό έργου 97507

ΠΟ-17. Μελέτη προσδιορισμού των επιπέδων της γεμισταβίνης στον ορό μυών και επίμυων χρησιμοποιώντας υγρή χρωματογραφία υψηλής απόδοσης (HPLC)

Λαφαζάνης Κ., Μπέγας Η., Παπαποστόλου Ι. Δήμας Κ.

Εργαστήριο Φαρμακολογίας, Ιατρική Σχολή Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, Λάρισα

e-mail: kostaslfz@gmail.com, begas@uth.gr, papapostolou.iris@gmail.com, ksdimas@yahoo.com

Εισαγωγή: Η γεμισταβίνη (Gem), είναι ένας αντιμεταβολίτης πυριμιδίνης η οποία μεταβολίζεται από την απαμινάση της κυτιδίνης στο πλάσμα και στο ήπαρ για να σχηματίσει την ανενεργή ένωση, 2', 2''-διφθοροδεοξουριδίνη (dFdU). Χρησιμοποιείται για τη θεραπεία του παγκρεατικού και του μη μικροκυτταρικού καρκίνου του πνεύμονα, καθώς και ως θεραπεία δεύτερης γραμμής, σε συνδυασμό με τοαντικαρκινικό φάρμακο paclitaxel, στον καρκίνο του μαστού.

Σκοπός: Στόχος της παρούσας μελέτης ήταν η βελτίωση και η πιστοποίηση μιας απλής και χαμηλού κόστους, μεθόδου διαχωρισμού και ποσοτικοποίησης της γεμισταβίνης (Gem) καθώς και του κύριου μεταβολίτη της (dFdU) σε ορό μυών και επίμυων.

Υλικά και μέθοδοι: Για τη φαρμακοκινητική μελέτη χρησιμοποιήθηκαν αρσενικοί μύες και επίμυες με μέσο βάρος 29 και 300 gr, αντίστοιχα. Τα ζώα χωρίστηκαν σε τρεις ομάδες (n = 5 / ομάδα για τους μύες και n=3/ ομάδα για τους επίμυες). Η πρώτη ομάδα χρησιμοποιήθηκε ως ομάδα ελέγχου, ενώ οι υπόλοιπες δύο ομάδες έλαβαν μία εφάπαξ δόση Gem στα 100 mg/kg είτε ενδοπεριτοναϊκώς (IP) είτε υποδοριώς (SC). Τα δείγματα αίματος συλλέχθηκαν στα 5, 15 min, 1, 2, 4 και 6h για τους μύες και στα 30 min, 1, 2 και 24 h για τους επίμυες, μετά τη χορήγηση του υπό μελέτη φαρμάκου. Το 1,7-διμεθυλουρικό οξύ (1,7 U) χρησιμοποιήθηκε ως εσωτερικό πρότυπο (IS). Η ανάλυση των δειγμάτων πραγματοποιήθηκε χρησιμοποιώντας στήλη Spherisorb S50DS2 (4,6 mm x 25 cm), η κινητή φάση αποτελούνταν από φωσφορικό ρυθμιστικό διάλυμα 50mM (pH=6,6) και μεθανόλη (97/3 v/v). Η έκλουση ήταν ισοκρατική με ταχύτητα ροής 1,0 ml/min. Το μήκος κύματος ανίχνευσης ήταν 267nm και η θερμοκρασία της στήλης 40°C.

Αποτελέσματα: Η πρότυπη καμπύλη ήταν γραμμική σε συγκεντρώσεις μεταξύ 1-500μM ($R^2 = 0,997$). Ο συντελεστής διακύμανσης ήταν <6,52% και το συστηματικό σφάλμα <-7,77%. Το όριο ποσοτικού προσδιορισμού και ανίχνευσης της μεθόδου ήταν στα 1μM και 0,17μM, αντίστοιχα. Οι χρόνοι έκλουσης για την Gem, IS και dFdU ήταν 8,74 ($\pm 0,19$), 9,98 ($\pm 0,3$) και 12,34 ($\pm 0,11$) min, αντίστοιχα. Η φαρμακοκινητική μελέτη κατέδειξε σημαντικές διαφορές μεταξύ των δύο τρόπων χορήγησης με την ενδοπεριτοναϊκή οδό να εμφανίζει υψηλότερες συγκεντρώσεις για τα ίδια χρονικά σημεία λήψης αίματος.

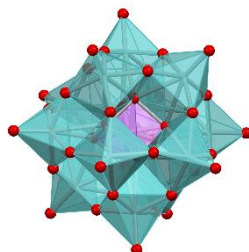
Συμπεράσματα: Στην παρούσα εργασία, αναπτύχθηκε και επικυρώθηκε μία μέθοδος HPLC-UV για τον προσδιορισμό της Gem σε ορό μυών και επίμυων με πιθανή εφαρμογή στην κλινική πράξη.

**ΠΟ-18. Σύνθεση και χαρακτηρισμός ενός νέου τύπου
ετεροπολυοξομολυβδαινικού ανιόντος και εφαρμογή του στην παραγωγή
102 για την οξείδωση αλκενίων**

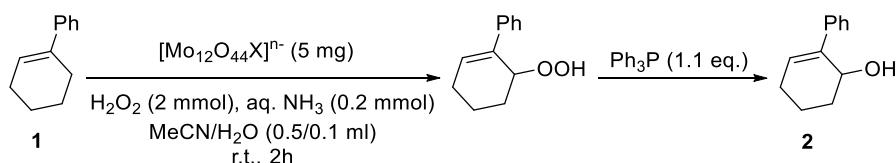
Δήμητρα Γιοφτσίδου,¹ Μιχάλης Καλλιτσάκης,¹ Αντώνιος Χατζηδημητρίου,¹ Μιχάλης Τερζίδης,² Ιωάννης Λυκάκης,¹ Παναγιώτης Αγγαρίδης¹

¹ Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα. ² Τμήμα Επιστημών Διατροφής και Διαιτολογίας, Διεθνές Πανεπιστήμιο της Ελλάδος, 57400, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα. **email:** lykakis@chem.auth.gr panosangaridis@chem.auth.gr mterzidis@nutr.teithe.gr

Στην πρόσφατη βιβλιογραφία έχουν αναφερθεί πολλά παραδείγματα αντιδράσεων οξείδωσης οργανικών ενώσεων με τη χρήση διεγερμένου μοριακού οξυγόνου απλής κατάστασης (¹O₂) που παράγεται με τη επίδραση ακτινοβολίας παρουσία κατάλληλων φωτοευαίσθητοποιητών.^{1,2} Ένας εναλλακτικός, αλλά ιδιαίτερα ελκυστικός για τη βιομηχανία, τρόπος παραγωγής του ¹O₂ βασίζεται στη χρήση αλάτων του μολυβδαινίου (Mo) παρουσία κατάλληλων οξειδωτικών αντιδραστηρίων, όπως το H₂O₂, το οποίο σε αλκαλικό περιβάλλον μετατρέπεται σε H₂O και ¹O₂.³ Ένα είδος ενώσεων του Mo, που έχει χρησιμοποιηθεί ελάχιστα για το σκοπό αυτό, είναι τα πολυοξομολυβδαινικά ανιόντα, τα οποία είναι νανοσωματιδιακού μεγέθους ανιοντικά πολυμεταλλικά οξείδια, εμφανίζουν μεγάλη δομική ποικιλότητα και πληθώρα εφαρμογών σε διάφορους τομείς (κατάλυση, ιατρική, απεικόνιση).⁴ Στην παρούσα μελέτη παρουσιάζεται η σύνθεση και ο προσδιορισμός της μοριακής δομής με κρυσταλλογραφία ακτίνων-X ενός νέου τύπου ετεροπολυοξομολυβδαινικού ανιόντος με γενικό τύπο [Mo₁₂O₄₄X]ⁿ⁻ (Εικόνα 1), η μελέτη των οπτικών και ηλεκτροχημικών ιδιοτήτων του, καθώς και η αποτελεσματική χρήση του στην in situ παραγωγή ¹O₂ για την οξείδωση του 1-φαινυλο-κυκλοεξενίου (Σχήμα 1).



Εικόνα 1. Κρυσταλλική δομή του ετεροπολυοξομολυβδαινικού ανιόντος με γενικό τύπο [Mo₁₂O₄₄X]ⁿ⁻.



Σχήμα 1. Οξείδωση του 1-φαινυλο-κυκλοεξενίου που παρουσιάζεται στην εργασία αυτή.

Αναφορές

1. Z. Tang, Y. Liu, M. He, W. Bu, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 946.
2. P. Bayer, J. Schachtner, M. Majek, A. J. von Wangelin, *Org. Chem. Front.* **2019**, 6, 2877.
3. G. Liu, J. Zhu, H. Guo, A. Sun, P. Chen, L. Xi, W. Huang, X. Song, X. Dong, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, 58, 18641.
4. C. Li, A. Jimbo, K. Yamaguchi, K. Suzuki, *Chem. Sci.* **2021**.

ΠΟ-19. Σύνθεση, χαρακτηρισμός και βιολογική δράση συμπλόκων ενώσεων του Έρβιου (Er) με υποκατεστημένες σαλικυλαλδεΐδες

Γκίσιου Χ., Χατζηδημητρίου Α., Ψωμάς Γ.
Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
email: xyrsoulagissiou@gmail.com , gepsomas@chem.auth.gr

Το στοιχείο Έρβιο (Er) ανήκει στην ομάδα των Λανθανιδίων του Περιοδικού Πίνακα. Οι μελέτες ως προς τη βιολογική δραστηριότητα του Er αυξάνονται τα τελευταία χρόνια [1]. Από την άλλη πλευρά, οι σαλικυλαλδεΐδες και τα παράγωγά τους εμφανίζουν ευρύ και ιδιαίτερο αντιμικροβιακό ενδιαφέρον στον ερευνητικό τομέα [2]. Η παρούσα εργασία έχει ως στόχο τη σύνθεση και το χαρακτηρισμό συμπλόκων ενώσεων του τρισθενούς ερβίου με υποκατεστημένες σαλικυλαλδεΐδες. Τα σύμπλοκα που παρασκευάστηκαν μελετήθηκαν με φασματοσκοπικές και φυσικοχημικές μεθόδους και με κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ. Η αλληλεπίδραση των συμπλόκων με το calf-thymus DNA μελετήθηκε με φασματοσκοπία UV-vis και ιξωδομετρία και μέσω της ανταγωνιστικής δράσης με το αιθίδιο βρωμίδιο. Τέλος, μελετήθηκε η αλληλεπίδραση των ενώσεων με αλβουμίνη του ορού με φασματοσκοπία φθορισμού.

Η εργασία αυτή πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο της μεταπτυχιακής διατριβής της κ. Χρυσούλας Γκίσιου σύμφωνα με το πρόγραμμα σπουδών του ΔΠΜΣ «Ανόργανη Βιολογική Χημεία» που λειτουργεί στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων με τη συνεργασία των Τμημάτων Χημείας των Πανεπιστημίων Ιωαννίνων, Αθήνας, Θεσσαλονίκης, Πάτρας, Κρήτης και του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Κύπρου.

Βιβλιογραφία

1. J. Ni, *Bioinorganic Chemistry of Rare Earth Elements*. Beijing: Science Press, 1995.
2. E. Pelttari, E. Karhumäki, J. Langshaw, H. Peräkylä, H. Elo, *Z. Naturforsch.* **62c** (2007) 487-497.

ΠΟ-20. Μαγνητο-φθορίζοντα νανოსύνθετα: Σύνθεση, χαρακτηρισμός, εφαρμογή επαγόμενης μαγνητικής υπερθερμίας

Π. Δημόπουλος Τουρσίσης, Κ. Βαμβακίδης, Κ. Δενδρινού Σαμαρά

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

Τμήμα Χημείας Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

email: dimoroupc@chem.auth.gr

Η πολυλειτουργική απεικόνιση αποτελεί νέα τάση στη βιοϊατρική τεχνολογία και ιδιαίτερα στη θεραπεία και διάγνωση του καρκίνου. Η πρόσφατη πρόοδος της νανοτεχνολογίας επιτρέπει το σχεδιασμό νανουλικών που όχι μόνο είναι κατάλληλα για πολυλειτουργική απεικόνιση, αλλά στοχεύουν και στη θεραπεία. Η σύνθεση νανოსύνθετων φορέων διπλής απεικονιστικής ικανότητας μέσω μαγνητικής τομογραφίας και απεικόνισης φθορισμού (MRI/OFI) με ταυτόχρονη θεραπευτική δράση μέσω Μαγνητικής Υπερθερμίας (MH) αποτελεί μια πρόκληση.

Στην παρούσα εργασία αρχικά παρασκευάστηκαν υπερπαραμαγνητικά νανοσωματίδια φερρίτη μαγγανίου $MnFe_2O_4$, μικρού μεγέθους (9nm), υψηλής κρυσταλλικότητας και μαγνήτισης 55 emu/g καθώς και το φθορίζον σύμπλοκο του ρουθηνίου, $[Ru(bpy)_3]^{2+}$. Τα μαγνητο-φθορίζοντα νανοςύνθετα πρόεκυψαν μέσω δευτερογενών διαδικασιών. Τα αρχικά μαγνητικά νανοσωματίδια ενθυλακώθηκαν σε δωδεκυλοθειικό νάτριο (SDS) για να σχηματιστούν σταθερά αρνητικά φορτισμένα υδρόφιλα nanoclusters (NCs) στα οποία έγινε η ηλεκτροστατική σύζευξη των θετικά φορτισμένων $[Ru(bpy)_3]^{2+}$. Μια ποικιλία τεχνικών χρησιμοποιήθηκαν για την επιβεβαίωση της σύζευξης του συμπλόκου στα NCs όπως φασματοσκοπία FT-IR, UV-vis και φθορισμού. Σταθερές κolloειδής διασπορές σε νερό των νανοςύνθετων μαγνητο-φθορισμού εξετάστηκαν ως φορείς μαγνητικής υπερθερμίας σε διάφορες συγκεντρώσεις και μετρήθηκε η θερμική τους απόκριση. Υπολογίστηκαν οι θερμικές απώλειες που δημιουργούν σε διάταξη μαγνητικής υπερθερμίας.

ΠΟ-21. Μεταλλοργανικά πλέγματα του Zr⁴⁺ ως φωταυγών αισθητήρων ιόντων Pb²⁺ και Cu²⁺ σε υδατικά διαλύματα

Σταύρος Διαμαντής,^{1,*} Αναστασία Πουρνάρα,² Ειρήνη Κουτσουρούμπη,³

Γεράσιμος Αρματάς,³ Μανώλης Μάνος,² Θεόδωρος Λαζαρίδης¹

¹Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, 54124,

² Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, 45110

³Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, Εργαστήριο Χημείας Υλικών, 70013
e-mail: sdiamant@chem.auth.gr,

Τα ιόντα βαρέων μετάλλων αποτελούν μια κατηγορία μη βιοδιασπώμενων ρύπων που επηρεάζουν το παγκόσμιο περιβάλλον. Ως αποτέλεσμα, υπάρχει μια ολοένα αυξανόμενη ανάγκη ταυτοποίησης και συνεχούς παρακολούθησης αυτών των χημικών ειδών. Προς αυτό το σκοπό, οι αναλυτικές τεχνικές που βασίζονται στην φωταυγεία προσελκύουν αυξανόμενο ενδιαφέρον λόγω της υψηλής ευαισθησίας τους και της ικανότητάς τους να ενσωματωθούν σε φορητές συσκευές για χρήση στο πεδίο. Τα φωταυγή MOF βρίσκονται στο επίκεντρο του ερευνητικού ενδιαφέροντος ως αισθητήρες^{1, 2} καθώς αυτά διαθέτουν υψηλά πορώδεις δομές, οι οποίες μπορούν να φιλοξενήσουν διάφορα χημικά είδη, τα οποία μπορούν να προκαλέσουν αλλαγές στα χαρακτηριστικά εκπομπής τους, δημιουργώντας έτσι ένα σήμα ανίχνευσης. Στην παρούσα εργασία, παρουσιάζουμε δυο φωταυγή MOF του Zr⁴⁺ της οικογένειας των UiO-66 που βασίζονται σε γεφυρωτικά ligand τα οποία φέρουν χηλικές πλευρικές ομάδες. Μελέτες φθορισμού τόσο στα MOF όσο και ενώσεις μοντέλα αποκάλυψαν ότι τα υλικά αυτά παρουσιάζουν εξαιρετική ικανότητα ανίχνευσης σε πραγματικό χρόνο ιόντων Pb²⁺, Cu²⁺ σε επίπεδα ppb σε πόσιμο νερό, δείχνοντας υψηλή ευαισθησία και εκλεκτικότητα ακόμη και παρουσία διαφόρων ανταγωνιστικών ιόντων. Επιπλέον, μελέτες ρόφησης διαλείποντος έργου έδειξαν ότι τα MOF αυτά παρουσιάζουν εξαιρετική ικανότητα ρόφησης επιτρέποντας την αποτελεσματική απομάκρυνση αυτών των ρύπων από το νερό.

Το έργο συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση του ανθρώπινου ερευνητικού δυναμικού μέσω της υλοποίησης διδακτορικής έρευνας – 2^{ος} Κύκλος» (MIS-5000432), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (IKY).



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

Επιχειρησιακό Πρόγραμμα
Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού,
Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



1. Diamantis, S.A., et al., *Luminescent metal–organic frameworks as chemical sensors: common pitfalls and proposed best practices*. *Inorganic Chemistry Frontiers*, 2018. **5**(7): p. 1493-1511.
2. Kanan, S.M. and A. Malkawi, *Recent Advances in Nanocomposite Luminescent Metal-Organic Framework Sensors for Detecting Metal Ions*. *Comments on Inorganic Chemistry*, 2021. **41**(1): p. 1-66.

ΠΟ-22. Σύμπλοκα του Cu(II) με 5-φθόρο-σαλικυλαλδεΰδη και παράγωγα 1,10-φαινανθρολίνης: Σύνθεση, χαρακτηρισμός της δομής και αλληλεπίδραση με calf-thymus DNA και αλβουμίνες

Ευστρατία Δουλοπούλου, Αριάδνη Ζιάννα, Αντώνιος Χατζηδημητρίου, Γεώργιος Ψωμάς

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124
Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

e-mail: efidoulopoulou@gmail.com, gepsomas@chem.auth.gr

Ο χαλκός(II) αποτελεί μέταλλο του τομέα d του περιοδικού πίνακα και αποτελεί απαραίτητο ιχνοστοιχείο για τον ανθρώπινο οργανισμό. Τα σύμπλοκα του Cu(II) έχουν μελετηθεί ευρέως τα τελευταία χρόνια εξαιτίας των διαφόρων βιολογικών και τεχνολογικών εφαρμογών τους. Έχει παρατηρηθεί μεγάλο ενδιαφέρον, ερευνητικά, για τη χρήση τους σε αντικαρκινικά και αντιφλεγμονώδη φάρμακα [1]. Ταυτόχρονα, οι ενώσεις διαφόρων μεταλλικών ιόντων με τις σαλικυλαλδεΰδες αποτελούν αντικείμενο έρευνας τα τελευταία χρόνια όσον αφορά την αλληλεπίδρασή τους με βιομόρια, όπως το DNA καθώς και τις αλβουμίνες [2].

Στα πλαίσια της ερευνητικής μας εργασίας, συντέθηκαν και χαρακτηρίστηκαν με φασματοσκοπικές τεχνικές (IR, UV-vis) δυο μονοπυρηνικά σύμπλοκα του Cu(II) με την 5-φθόρο-σαλικυλαλδεΰδη (5-F-saloH) ως ligand παρουσία της 1,10-φαινανθρολίνης (phen) ή του παραγώγου της 2,9-διμεθυλο-1,10-φαινανθρολίνης (νεοκουπρωϊνη, neoc) που δότες ατόμων N. Η δομή των συμπλόκων [Cu(5-F-salo)(phen)(Cl)] (**1**) και [Cu(5-F-salo)(neoc)(Cl)] (**2**) επιλύθηκε με κρυσταλλογραφία ακτίνων X.

Χρησιμοποιήθηκαν φασματοσκοπικές (UV-vis) και φυσικοχημικές τεχνικές (μέτρηση ιξώδους) για τη μελέτη της αλληλεπίδρασης των συμπλόκων ενώσεων με το calf-thymus (CT) DNA. Επιπλέον πραγματοποιήθηκαν μελέτη της ανταγωνιστικής δράσης των συμπλόκων με το αιθίδιο βρωμίδιο (EB) με φασματοσκοπία φθορισμού. Η παρεμβολή είναι ο πιο πιθανός τρόπος αλληλεπίδρασης τους με το CT DNA. Η αλληλεπίδραση των συμπλόκων με πρωτεΐνες αλβουμίνης βοοειδών (BSA) και ανθρώπου (HSA) μελετήθηκε επίσης με φασματοσκοπία φθορισμού.

Η παρούσα έρευνα συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση Μεταδιδακτόρων ερευνητών/ερευνητριών - Β΄ Κύκλος» (MIS-5033021), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).

Βιβλιογραφία

[1] A. Hussain, M.F. Al Ajmi, M.T. Rehman, S. Amir, F.M. Husain, A. Alsalmeh, M.A. Siddiqui, A.A. Al Khedhairy, R.A. Khan, *Scientific Reports* 9 (2019) 5237

[2] A. Zianna, G.D. Geromichalos, A.G. Hatzidimitriou, E. Coutouli-Argyropoulou, M. Lalia-Kantouri, G. Psomas, *Journal of Inorganic Biochemistry* 194 (2019) 85-96.

ΠΟ-23. Επικαλυμμένα νανοσωματίδια ZnO: Σολβοθερμική σύνθεση, χαρακτηρισμός, in vitro μελέτη της πρωτεϊνικής αμυλοείδωσης της ινσουλίνης

¹ΜΑΡΙΑ-ΕΛΕΝΗ ΚΑΡΑΓΕΩΡΓΟΥ, ¹ΚΛΕΟΝΙΚΗ ΓΙΑΝΝΟΥΣΗ, ²ΗΛΙΑΣ ΟΙΚΟΝΟΜΟΥ, ²ΦΙΛΟΜΗΛΑ ΚΟΜΝΗΝΟΥ, ¹ΑΙΚΑΤΕΡΙΝΗ ΔΕΝΔΡΙΝΟΥ-ΣΑΜΑΡΑ

*¹Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124*

*²Τομέας Φυσικής Στερεάς Κατάστασης, Τμήμα Φυσικής,
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124*

e-mail: mariaelka@chem.auth.gr

Η πρωτεϊνική αμυλοείδωση αποτελεί ένα φαινόμενο κατά το οποίο, φυσιολογικά διαλυτά τμήματα πρωτεϊνών και πεπτιδίων συσσωματώνονται και μετατρέπονται σε ανθεκτικά στην πρωτεόλυση πρωτεϊνικά ινίδια, τα οποία εναποτίθενται στους νευρώνες του εγκεφάλου και σε άλλους ιστούς και σχετίζονται με ποικίλες νευροεκφυλιστικές διαταραχές, όπως το Alzheimer. Η συγκέντρωση των ιόντων Zn^{2+} ρυθμίζεται έντονα σε όλη την έκταση του αιματοεγκεφαλικού φραγμού, επηρεάζοντας τη δημιουργία πρωτεϊνικών ινιδίων. Το πεδίο της νανοτεχνολογίας εισάγει νέες θεραπευτικές προσεγγίσεις για την αντιμετώπιση τέτοιων διαταραχών που παραμένουν ανίατες μέχρι και σήμερα. Τα νανοσωματίδια ZnO διερευνούνται για την μεταφορά Zn^{2+} ιόντων. Στην παρούσα μελέτη πραγματοποιήθηκε η σύνθεση επικαλυμμένων οργανικών/ανόργανων νανοσωματιδίων ZnO, σολβοθερμικά μέσω μιας διαδικασίας ενός σταδίου, χρησιμοποιώντας πολυόλες (DEG, PG), ή αμίνες (ODA, OAm) σε τριπλό ρόλο (επικαλυπτικού, διαλύτη και αναγωγικού παράγοντα). Τα νανοσωματίδια ZnO χαρακτηρίστηκαν ως προς το σχήμα, το μέγεθος και τις επιφανειακές ιδιότητες με μεθόδους όπως IR, XRD, TEM, HRTEM, TGA, UV-Vis, και μελετήθηκαν ως προς την ανασταλτική τους δράση στο μηχανισμό δημιουργίας ινιδίων αμυλοειδούς της ινσουλίνης, πρωτεΐνη-μοντέλο της πρωτεϊνικής αμυλοείδωσης. Η μετατροπή των πρωτεϊνικών διαλυμάτων από διαυγή σε θολά υποδηλώνει τη δημιουργία ινών, η οποία επιβεβαιώθηκε με φθορισμομετρία, από την απότομη ενίσχυση του φθορισμού που προκαλείται όταν η θειοφλαβίνη-T συνδέεται εκλεκτικά με τα αμυλοειδή ινίδια. Βρέθηκε ότι όλα τα νανοσωματίδια ZnO, ανεξάρτητα των ιδιοτήτων τους, προκάλεσαν καθυστέρηση της λανθάνουσας φάσης και τελικά αναστολή της πρωτεϊνικής αμυλοείδωσης της ινσουλίνης έως και τρεις μέρες, ενώ επίσης με τη βοήθεια οπτικού μικροσκοπίου, διαπιστώθηκε διαφορά στη μορφολογία των παραγόμενων ινών. Τα συσσωματώματα που προκύπτουν μετά την επώαση με τα νανοσωματίδια ZnO είναι μικρότερα σε μέγεθος, και ίσως αδρανή.

ΠΟ-24. Σύνθεση, χαρακτηρισμός και μελέτη της βιολογικής δράσης ενώσεων συναρμογής του χαλκού(II) με την 5-φθορο-σαλικυλαλδεΰδη

Ζ. Παπαδόπουλος, Α. Ζιάνα, Α. Χατζηδημητρίου, Γ. Ψωμάς

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124
Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

email: zisispapad@chem.auth.gr, gepsomas@chem.auth.gr

Ο χαλκός(II) είναι ένα απαραίτητο ιχνοστοιχείο για όλους τους οργανισμούς, καθώς συμμετέχει στο σχηματισμό μερικών πολύ σημαντικών ενζύμων, όπως η σουπεροξειδική δισμουτάση και η οξειδάση του κυτοχρώματος C, που προστατεύουν τους οργανισμούς από το οξειδωτικό στρες [1]. Οι υποκατεστημένες σαλικυλαλδεΰδες και οι ενώσεις τους με διάφορα μεταλλικά ιόντα παρουσιάζουν ενδιαφέρον όσον αφορά την αλληλεπίδρασή τους με το DNA και τις αλβουμίνες [2,3]. Η παρούσα εργασία παρουσιάζει τη σύνθεση, το χαρακτηρισμό και τη μελέτη της βιολογικής δράσης των μονοπυρηνικών συμπλόκων [Cu(5-F-salo)(bipy)](NO₃) (**1**) και [Cu(5-F-salo)(dramH)(Cl)] (**2**). Οι δομές των συμπλόκων χαρακτηρίστηκαν με φασματοσκοπικές τεχνικές (UV-Vis, IR) και κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ (για το σύμπλοκο **2**). Τέλος, η βιολογική δράση των συμπλόκων ενώσεων επικεντρώθηκε στην αλληλεπίδρασή τους με το calf-thymus (CT) DNA (μελέτη με φασματοσκοπία UV-vis, ιξώδομετρία και ανταγωνιστική δράση με το αιθίδιο βρωμίδιο) και με τις αλβουμίνες HSA και BSA (μελέτη με φασματοσκοπία φθορισμού).

Η παρούσα έρευνα συγχρηματοδοτείται από την Ελλάδα και την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση», στο πλαίσιο της Πράξης «Ενίσχυση Μεταδιδακτόρων ερευνητών/ερευνητριών - Β΄ Κύκλος» (MIS-5033021), που υλοποιεί το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών (ΙΚΥ).

Βιβλιογραφία

1. Δ. Κεσίσογλου, Γ. Ψωμάς, "Βιοανόργανη Χημεία", Εκδόσεις ΖΗΤΗ, Θεσσαλονίκη, 2011.
2. A. Zianna, G.D. Geromichalos, A.G. Hatzidimitriou, E. Coutouli-Argyropoulou, M. Lalia-Kantouri, G. Psomas, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 194 (2019) 85-96.
3. A. Zianna, G. Psomas, A. Hatzidimitriou, M. Lalia-Kantouri, *RSC Advances*, 5 (2015) 37495-37511.

ΠΟ-25. Σύνθεση και χαρακτηρισμός επικαλυμμένων ZnO NPs υποψήφια για φορείς φαρμάκων

Α. Παύλου¹, Π. Τρύφων¹, Σ. Μουρδικούδης², Αικ. Δενδρινού-Σαμαρά^{1*}

¹Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης

² Department of Inorganic Chemistry, University of Chemistry and Technology, Prague

54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

email: akrivpavlo@chem.auth.gr

Τα τελευταία χρόνια υπάρχει έκρηξη ενδιαφέροντος για τα υλικά της νανοκλίμακας λόγω της μεγάλης επιφάνειας τους προς τη μονάδα όγκου τους. Ένα από αυτά τα υλικά είναι και τα νανοσωματίδια οξειδίου του ψευδαργύρου (ZnO NPs) που φέρουν ιδιαίτερες χημικές, οπτικές, μαγνητικές, μηχανικές ιδιότητες. Επίσης, από βιολογικές μελέτες αποδείχθηκε ότι τα ZnO NPs είναι βιοσυμβατά, και έχουν αντιβακτηριακή και αντιφλεγμονώδη δράση. Όλες οι ιδιότητες αυτές εξαρτώνται από τα φυσικοχημικά χαρακτηριστικά των ZnO. Το μέγεθος του ανόργανου πυρήνα, το σχήμα, η κρυσταλλικότητα καθώς και οι επιφανειακές του ιδιότητες αποτελούν κρίσιμους παράγοντες των ιδιοτήτων τους.

Στη παρούσα εργασία πραγματοποιήθηκε η σύνθεση υδρόφοβων ZnO NPs μέσω της διαλυτοθερμικής μεθόδου, η οποία είναι γρήγορη, φτηνή, φιλική προς το περιβάλλον και παρέχει καλή κρυσταλλικότητα στα υλικά με καλές αποδόσεις. Οι πρόδρομες ενώσεις ($Zn(acac)_2$ και $ZnCl_2$), τα επιφανειοδραστικά (ολεϋλαμίνη και οκταδεκυλαμίνη) και η πολυόλη (TrEG) που χρησιμοποιήθηκαν σε συνδυασμό με τη μεταβολή των συνθηκών της αντίδρασης, οδήγησαν στο σχηματισμό ZnO NPs διαφορετικής μορφολογίας και ιδιοτήτων. Τα νανοσωματίδια χαρακτηρίστηκαν με φασματοσκοπία υπερύθρου (FTIR), περίθλασης ακτίνων X (XRD), θερμοβαρυσμετρική ανάλυση (TGA), ηλεκτρονική μικροσκοπία διέλευσης (TEM) και φασματοσκοπία υπερύθρου-ορατού (UV-Vis). Το μέγεθος του κρυσταλλίτη κυμαίνεται από 18-32 nm, ενώ τα σχήματα που προέκυψαν είναι σφαιρικά και ράβδοι. Επίσης, η χρήση αλειφατικών αμινών οδήγησε στη δημιουργία διπλής στιβάδας (double-layer) στην επιφάνεια των νανοσωματιδίων. Μέσω μετασυνθετικών τροποποιήσεων διερευνήθηκε η σύνδεση τους με αντιφλεγμονώδη φάρμακα που διαθέτουν δραστικές -COOH ομάδες στο μόριο τους προκειμένου να μελετηθεί η συνεργιστική τους δράση.

ΠΟ-26. Σύμπλοκες ενώσεις του κοβαλτίου με σαλικυλαλδεΐδες: Σύνθεση, χαρακτηρισμός της δομής και μελέτη της βιολογικής δράσης

Η. Τρυγώνη, Α. Χατζηδημητρίου, Γ. Ψωμάς

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124
Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

e-mail: vtrygoni@gmail.com, gepsomas@chem.auth.gr

Η ταυτοποίηση της παρουσίας του κοβαλτίου ως κεντρικό μεταλλοϊόν στη βιταμίνη B₁₂ (κοβαλαμίνη), μια βιταμίνη απαραίτητη για τη σύνθεση του DNA, καθώς και σε άλλα οκτώ ένζυμα, έδωσε το έναυσμα για τη σύνθεση συμπλόκων του κοβαλτίου με σημαντικό βιολογικό ενδιαφέρον.¹ Επιπροσθέτως, σύμπλοκες ενώσεις της 2-υδροξυ-βενζαλδεΐδης (σαλικυλαλδεΐδης) και παραγώγων της με μεταλλικά ιόντα φαίνεται να παρουσιάζουν ενδιαφέρουσες αντιμικροβιακές και αντιβακτηριακές ιδιότητες.² Στην παρούσα εργασία αναφέρεται η παρασκευή και ο χαρακτηρισμός συμπλόκων ενώσεων του δισθενούς και του τρισθενούς κοβαλτίου με τη 2-υδροξυ βενζαλδεΐδη (σαλικυλαλδεΐδη) και ποικίλα παράγωγά της, παρουσία των N,N'-δοτών 1,10-φαινανθρολίνη (phen) ή 2,2'-διπυριδίνη (bipy). Επιπλέον, διερευνείται η ικανότητα σύνδεσης των παραπάνω συμπλόκων με την ανθρώπινη και την βοοειδή αλβουμίνη ορού με φασματοσκοπία φθορισμού, καθώς και η αλληλεπίδρασή τους με το calf-thymus DNA με φασματοσκοπία UV-vis, ιξωδομετρία και μέσω της ανταγωνιστικής δράσης τους με το αιθίδιο βρωμίδιο.

Η εργασία αυτή πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο της μεταπτυχιακής διατριβής της κ. Ηλέκτρας Βαλεντίνης Τρυγώνη σύμφωνα με το πρόγραμμα σπουδών του ΔΠΜΣ «Ανόργανη Βιολογική Χημεία» που λειτουργεί στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων με τη συνεργασία των Τμημάτων Χημείας των Πανεπιστημίων Ιωαννίνων, Αθήνας, Θεσσαλονίκης, Πάτρας, Κρήτης και του Τμήματος Χημείας του Πανεπιστημίου Κύπρου.

¹G. Psomas, D. Kessissoglou, *Dalton Trans.*, **2013**, 42, 6552.

²A. Zianna, G. Geromichalos, A. Pekou, A. Hatzidimitriou, E. Coutouli-Argyropoulou, M. Lalia Kantouri, A. Pantzaki, G. Psomas, *J. Inorg. Biochem.*, **2019**, 199, 110792.

ΠΟ-27. Σύνθεση, κρυσταλλικές δομές και φωτοφυσικά χαρακτηριστικά φωταυγών πολυπυρηνικών συμπλόκων του χαλκού(I) με διφωσφίνες και πολυδραστικά ανιόντα καρβοξυλικών οξέων

Α. Τσιότσια, Δ. Κ. Γιοφτσίδου, Α. Χατζηδημητρίου, Π. Αγγαρίδης

Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
Θεσσαλονίκη, Ελλάδα,

e-mail: panosangaridis@chem.auth.gr

Τις τελευταίες δεκαετίες, η τεχνολογία των οργανικών διόδων εκπομπής φωτός (OLEDs) έχει προσελκύσει μεγάλο επιστημονικό ενδιαφέρον λόγω της εφαρμογής της σε μια ποικιλία οπτοηλεκτρονικών διατάξεων, όπως στον τεχνητό φωτισμό.[i] Οι συσκευές OLED που είναι σήμερα σε χρήση συχνά χρησιμοποιούν ως υλικά εκπομπής φωσφορίζοντα σύμπλοκα μετάλλων της ομάδας του λευκοχρύσου (π.χ. ιρίδιο και λευκόχρυσος).[ii] Ένα άλλο είδος υλικών εκπομπής που μπορεί να οδηγήσει σε μεγάλης απόδοσης συσκευές OLED βασίζεται στα φωταυγή σύμπλοκα του χαλκού(I), πολλά από τα οποία χαρακτηρίζονται από πολύ υψηλές αποδόσεις εκπομπής, όπως π.χ. κάποια μονοπυρηνικά σύμπλοκα του τύπου $[Cu(PP)(NN)]^+$ με χηλίκως συναρμοσμένες διφωσφίνες (PP) και διιμίνες πυριδινικού τύπου (NN). Επίσης, οι ενώσεις αυτές βασίζονται σε ένα μεγάλης αφθονίας, χαμηλού κόστους και περιβαλλοντικά αβλαβές μέταλλο.[iii] Τα φωτοφυσικά χαρακτηριστικά εκπομπής των συμπλόκων του χαλκού(I) εξαρτώνται άμεσα τόσο από το είδος των ατόμων δοτών των ligand που φέρουν, τη γεωμετρία συναρμογής του μεταλλικού κέντρου και την πυρηνικότητα των συμπλόκων.

Στο πλαίσιο αυτό, στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται η σύνθεση και ο χαρακτηρισμός μιας σειράς φωταυγών συμπλόκων ενώσεων του χαλκού(I) που φέρουν ως ligand συνδυασμούς της διφωσφίνης 1,1-bis(diphenylphosphino)methane ή dppm (με δύο άτομα φωσφόρου ως πιθανούς δότες) και ανιόντα διαφόρων πολυδραστικών καρβοξυλικών οξέων (με δύο άτομα οξυγόνου ως πιθανούς δότες). Ο προσδιορισμός της μοριακής δομής των ενώσεων αυτών πραγματοποιήθηκε με κρυσταλλογραφία ακτίνων X σε μονοκρυστάλλους και έδειξε ότι πρόκειται για κατιονικά πολυμεταλλικά σύμπλοκα που βασίζονται σε διμεταλλικές μονάδες $[(\mu_2\text{-dppm})Cu_2]^{2+}$ που γεφυρώνονται με διάφορα ανιόντα πολυδραστικών καρβοξυλικών οξέων. Μελέτη των ενώσεων αυτών με φασματοσκοπία εκπομπής στη στερεά κατάσταση έδειξε τον έντονα φωταυγή χαρακτήρα τους, με μέγιστα μηκών κύματος εκπομπής στην περιοχή 470-510 nm. Η επίδραση της φύσης της γεφυρωτικού καρβοξυλικού ανιόντος όπως επίσης και της παρουσίας μεταλλοφιλικών αλληλεπιδράσεων στα φωτοφυσικά χαρακτηριστικά της εκπομπής των συμπλόκων είναι αξιοσημείωτη, γεγονός που φανερώνει την συμμετοχή αυτών στην χαμηλότερης ενέργειας εκπέμπουσα διεγερμένη κατάσταση τους. Τα πρώιμα αυτά αποτελέσματα αποτελούν μια πολλά υποσχόμενη αρχή για την περαιτέρω επέκταση αυτής της κατηγορίας φωταυγών ενώσεων και τη διεξοδική μελέτη των ιδιοτήτων εκπομπής τους, με στόχο την ανάπτυξη νέων και έντονα φωταυγών ενώσεων συναρμογής του χαλκού(I).

Αναφορές

- 1 N. Thejo Kalyani and S. J. Dhoble, *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2015**, *44*, 319.
- 2 (a) M. A. Baldo, Y. O'Brian, A. You, A. Shoustikov, S. Sibley, M. E. Thompson, S. R. Forrest *Nature* (London) **1998**, *395*, 151, (b) C. Bizzarri, E. Spuling, D. M. Knoll, D. Volz, S. Bräse, *Coord. Chem. Rev.* **2018**, *373*, 49.
- 3 (a) D. Volz, Y. Chen, M. Wallesch, R. Liu, C. Fléchon, D. M. Zink, J. Friedrichs, H. Flügge, R. Steining, J. Göttlicher, C. Heske, L. Weinhardt, S. Bräse, F. So, T. Baumann *Adv. Mater.* **2015**, *27*, 2538. (b) C. Bizzarri, F. Hundemer, J. Busch, S. Bräse, *Polyedron*, **2018**, *140*, 51.

ΠΟ-28. Σύνθεση ενός φθορίζοντος μεταλλοργανικού πλέγματος Zr^{4+} και μελέτη του ως φωταυγούς αισθητήρα για την ανίχνευση πικρικού οξέος στο νερό.

Αμίνα Χατζ-Γιάχια,¹ Σταύρος Διαμαντής,¹ Αναστασία Πουρνάρα²,
Κωνσταντίνος Τριανταφυλλίδης¹, Χριστίνα Παππά¹, Γεράσιμος Αρματάς³,
Ειρήνη Κουτσορούμπη³, Θεόδωρος Λαζαρίδης*¹

¹Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας, Τμήμα Χημείας,

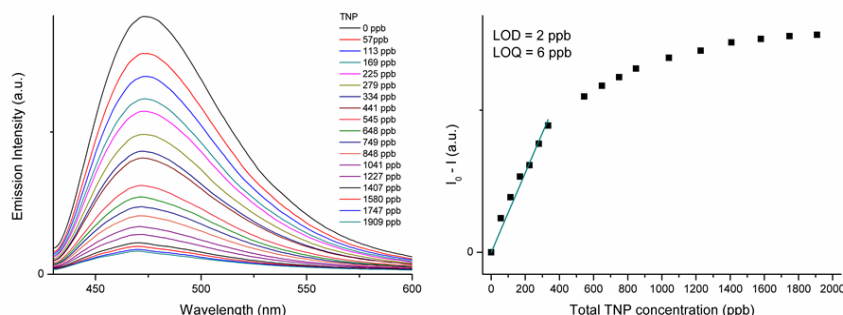
Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα,

²Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 45110 Ιωάννινα, Ελλάδα

³Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών, Πανεπιστήμιο Κρήτης, 71003 Ηράκλειο, Ελλάδα

e-mail: chatamin@chem.auth.gr tlazarides@chem.auth.gr

Τα τελευταία χρόνια, τα φωταυγή μεταλλοργανικά πλέγματα βρίσκονται στο επίκεντρο του ερευνητικού ενδιαφέροντος λόγω της ικανότητάς τους να λειτουργούν ως ανιχνευτές μικρών μορίων και ιόντων. Η ιδιότητα αυτή βασίζεται στη μεταβολή της φωταύγειας του υλικού ως απόκριση στην εισαγωγή των μορίων προς ανίχνευση στους πόρους του MOF. Μία πιθανή εφαρμογή των MOF είναι η ανίχνευση νιτροαρωματικών ενώσεων στο νερό, όπως οι νιτροφαινόλες 2,4,6-trinitrophenol (TNP) και η 2,4-dinitrophenol (DNP). Οι νιτροαρωματικές ενώσεις είναι αποδεδειγμένα τοξικές και εμφανίζουν εκρηκτικές ιδιότητες. Πιθανή διαρροή τους στο υδάτινο περιβάλλον μπορεί να αποτελέσει δημόσιο κίνδυνο για την ασφάλεια και την υγεία των ανθρώπων. Στην παρούσα εργασία, πραγματοποιήθηκε η σύνθεση ενός οργανικού ligand με βάση το aminoterephthalic acid και ενός φωταυγούς MOF του $Zr(IV)$ δομικού τύπου UiO-66 με ικανότητα ρόφησης TNP και DNP. Οι δομές του ligand και του MOF ταυτοποιήθηκαν με τις απαραίτητες τεχνικές (φασματοσκοπία NMR και IR, φασματομετρία ESI-MS, ανάλυση PXRD). Η θερμική σταθερότητα του MOF εξετάστηκε με θερμοσταθμική ανάλυση. Η ενεργή επιφάνεια του υλικού σύμφωνα με τη μέθοδο BET καθορίστηκε μέσω της ισόθερμης ρόφησης για N_2 . Τα χαρακτηριστικά φωταύγειας του ligand και του MOF μελετήθηκαν με φασματοσκοπία απορρόφησης και φθορισμού UV-Vis. Τέλος, πειράματα τιτλοδότησης φθορισμού έδειξαν ότι το MOF αποκρίνεται εκλεκτικά σε χαμηλές συγκεντρώσεις TNP και DNP με απόσβεση της φωταύγειάς του.



Εικόνα 1: Απόσβεση φθορισμού σε αιώρημα MOF του Zr^{4+} και η αντίστοιχη γραμμική προσαρμογή της καμπύλης βαθμονόμησης της τιτλοδότησης φθορισμού.

Το ερευνητικό έργο υποστηρίχθηκε από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας (ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.) στο πλαίσιο της Δράσης «2η Προκήρυξη ερευνητικών έργων ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. για την ενίσχυση Μεταδιδακτορικών Ερευνητών/τριών (Αριθμός Έργου:3371)



ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ.
Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας & Καινοτομίας

ΠΟ-28α: Διπυρηνικά σύμπλοκα του Cu(I) και Ag(I) με φωσφίνες και γέφυρα 1,1'-(1,4-phenylene) bis(N-(pyridin-2-ylmethylene)methanamine)

Α. ΣΤΑΜΑΤΙΟΥ¹, Σ. ΤΣΙΑΝΤΗΣ², Δ. ΤΖΗΜΟΠΟΥΛΟΣ³, Α. ΧΑΤΖΗΔΗΜΗΤΡΙΟΥ⁴, Π. ΑΚΡΙΒΟΣ⁵

¹Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

²Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Πατρών, 26504, Πάτρα,

³Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

⁴Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

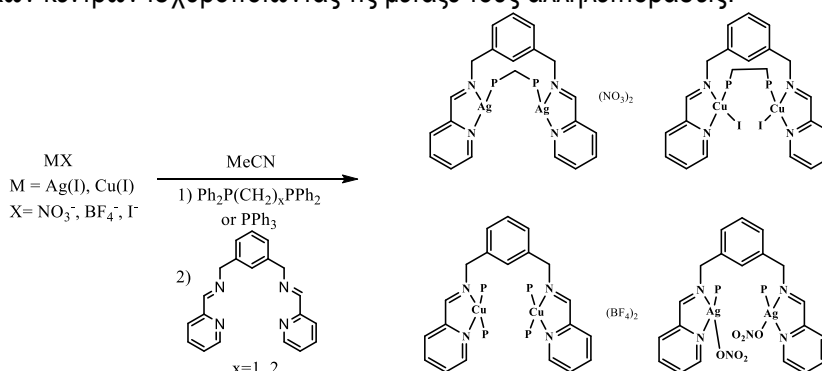
⁵Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

antonisstamatiou26@gmail.com, sokratis.t.tsantis@gmail.com,
dimtzim@auth.gr, hatzidim@chem.auth.gr akrivos@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Τα διπυρηνικά σύμπλοκα του χαλκού παρουσιάζουν σημαντικό ενδιαφέρον στο πεδίο της βιοανόργανης χημείας ειδικά με πολυδραστικά ligands [1,2]. Η χημική δραστηριότητα ενώσεων και κυρίως των μεταλλοενζύμων οφείλεται στη γεωμετρία που υιοθετείται στην περιοχή ενός ή περισσοτέρων μεταλλικών κέντρων που υπάρχουν στο μακρομόριο [3].

Στη παρούσα εργασία παρουσιάζεται η σύνθεση και η μελέτη τεσσάρων διπυρηνικών ενώσεων συναρμογής του Cu(I) και του Ag(I). Στη σφαίρα συναρμογής υπάρχουν τριφαλινυλοφωσφίνη, δισ(διφαινυλοφωσφίνο)μεθάνιο ή δισ(διφαινυλοφωσφίνο)αιθέριο και ως γέφυρα το τετραδοντικό 1,1'-(1,4-phenylene)bis(N-(pyridin-2-ylmethylene) methanamine). Επιλύθηκαν όλες οι κρυσταλλικές δομές και επιβεβαιώθηκε η παρουσία δύο μεταλλικών κέντρων ανά μόριο, ενώ διαπιστώθηκε το ίδιο δομικό μοτίβο σε όλες, με τα δύο άτομα μετάλλου να συναρμολούνται στις δύο διμινικές περιοχές του ligand. Η παρουσία των διφωσφινών περιορίζει την απόσταση μεταξύ των μεταλλικών κέντρων ισχυροποιώντας τις μεταξύ τους αλληλεπιδράσεις.



Βιβλιογραφία

[1] A. Arnold, C. Limberg and R. Metzinger, *Inorg. Chem.*, 2012, 51, 12210–12217.

[2] L. Tahsini, H. Kotani, Y.-M. Lee, J. Cho, W. Nam, K. D. Karlin and S. Fukuzumi, *Chem. – Eur. J.*, 2012, 18, 1084–1093.

[3] Rabiul Alam, Kaberi Pal, Bikash Kumar Shaw, Malay Dolai, Nabanita Pal, Shyamal Kumar Saha and Mahammad Ali, *Polyhedron*, 106, 2016, 84-91

ΠΟ-28B. Διπυρηνικά σύμπλοκα του Cu(I) και Ag(I) με το ligand 3-(2-pyridyl)-5,6-diphenyl-1,2,4-triazine και γέφυρα διφωσφίνη

Α. ΣΤΑΜΑΤΙΟΥ¹, Σ. ΤΣΙΑΝΤΗΣ², Δ. ΤΖΗΜΟΠΟΥΛΟΣ³, Α. ΧΑΤΖΗΔΗΜΗΤΡΙΟΥ⁴, Π. ΑΚΡΙΒΟΣ⁵

¹Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

²Τμήμα Χημείας, Σχολή Θετικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Πατρών, 26504, Πάτρα,

³Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

⁴Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

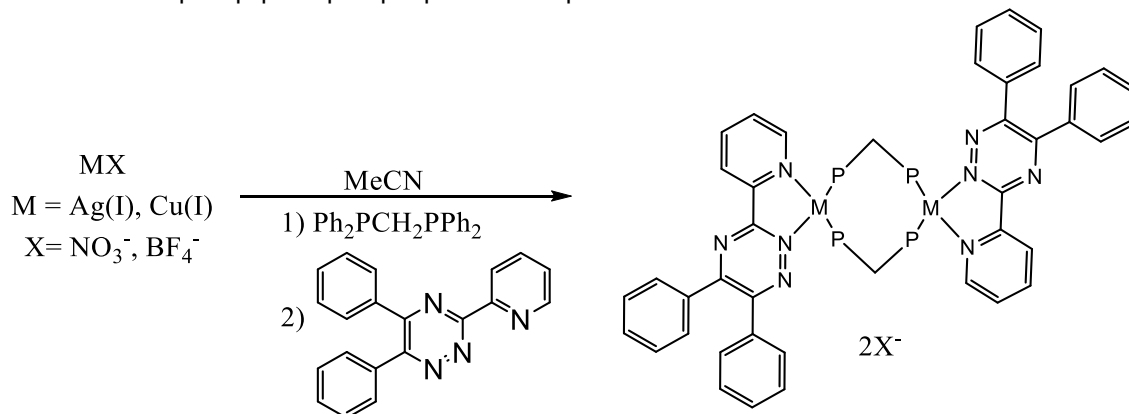
⁵Τμήμα Χημείας Α.Π.Θ. – Εργαστήριο Ανόργανης Χημείας,

antonisstamatiou26@gmail.com, sokratis.t.tsantis@gmail.com,
dimtzim@auth.gr, hatzidim@chem.auth.gr akrivos@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Πολυμεταλλικά συγκροτήματα ενώσεων συναρμογής έχουν ενδιαφέρον λόγω της πιθανής εφαρμογής των μαγνητικών, ηλεκτροχημικών, οπτικών και καταλυτικών ιδιοτήτων που εμφανίζουν [1]. Ενώσεις συναρμογής των Cu(I) και Ag(I) με φωταυγείς ιδιότητες αποτελούν ένα ευρύ πεδίο μελέτης ειδικά λόγω της πιθανής χρήσης τους ως (organic light-emitting diode). Επιπλέον, τα μέταλλα αυτά έχουν χαμηλότερο κόστος και δεν είναι τοξικά σε σύγκριση με πολλά άλλα χρησιμοποιούμενα μέταλλα [2]. Σύμπλοκα του Cu(I) και Ag(I) με ligands N-δότες και ειδικότερα διιμίνες, αποτελούν χαρακτηριστικά και αντιπροσωπευτικά παραδείγματα στις μελέτες φωταύγειας.

Στη παρούσα εργασία παρουσιάζεται η σύνθεση και η μελέτη δύο διπυρηνικών ενώσεων συναρμογής του Cu(I) και του Ag(I) με δισ(διφαινουλοφωσφίνο)μεθάνιο και το διιμινικού τύπου ligand 3-(2-pyridyl)-5,6-diphenyl-1,2,4-triazine. Η επίλυση της κρυσταλλικής τους δομής επιβεβαίωσε το ίδιο δομικό μοτίβο. Συγκεκριμένα τα δύο άτομα μετάλλου, συναρμόζονται με μια διιμίνη το καθένα και γεφυρώνονται από τις διφωσφίνες. Οι αποστάσεις μεταξύ των ατόμων μετάλλου είναι 4,686 Å και 3,889 Å για το χαλκό και τον άργυρο αντίστοιχα, γεγονός που αποδίδεται στη διαφορετική ατομική ακτίνα του μετάλλου.



Βιβλιογραφία

[1] J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VCH, Weinheim, 1995

[2] Volz, D.; Wallesch, M.; Flechon, C.; Danz, M.; Verma, A.; Navarro, J. M.; Zink, D. M.; Brase, S.; Baumann, T. From Iridium and Platinum to Copper and Carbon: New Avenues for More Sustainability in Organic Light-Emitting Diodes. *Green Chem.* 2015, 17, 1988–2011

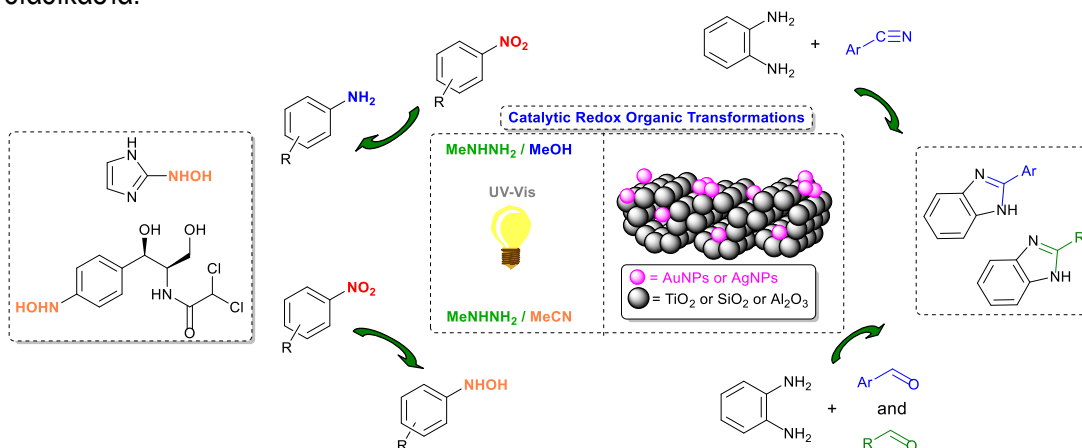
ΠΟ-29. Καταλυτικές διεργασίες σύνθεσης N-αρυλο υδροξυλαμινών και N-ετεροκυκλικών ενώσεων με τη χρήση νανοσωματιδίων των μετάλλων

Ιωάννου Δ., Τζάνη Μ., Σιακαβάρας Ν., Καλλιτσάκης Μ. και Λυκάκης Ι.*
 Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Πανεπιστημιούπολη, GR-54124
 Θεσσαλονίκη

*e-mail: lykakis@chem.auth.gr

Abstract:

Μια ελκυστική προσέγγιση όσον αφορά τις καταλυτικές διεργασίες είναι η χρήση υποστηριζόμενων καταλυτών, η οποία προσφέρει πολλά πλεονεκτήματα στην επαναχρησιμοποίηση του καταλύτη και στην χημειο-εκλεκτικότητα της αντίδρασης.¹ Στην παρούσα εργασία περιγράφεται η ερευνητική μελέτη της φωτο- και θερμικής καταλυτικής εφαρμογής ετερογενών συστημάτων νανοσωματιδίων των μεταβατικών μετάλλων AuNPs και AgNPs, με σκοπό την παροχή «πράσινων» καταλυτικών χημικών οξειδοαναγωγικών μετασχηματισμών, προς τη σύνθεση ετεροκυκλικών ενώσεων υψηλού βιολογικού ενδιαφέροντος.^{2,3} Επιπλέον, νέα σύμπλοκα, όπως το *tris(N-Heterocyclic Thioamidate)Co (III)*² χρησιμοποιήθηκαν για την φωτο- και θερμική καταλυτική ανάπτυξη της σύνθεσης σημαντικών βιολογικών μορίων χρησιμοποιώντας συνήθη αρχικές ενώσεις και υπό απλή *one-pot* διαδικασία.^{2,3}



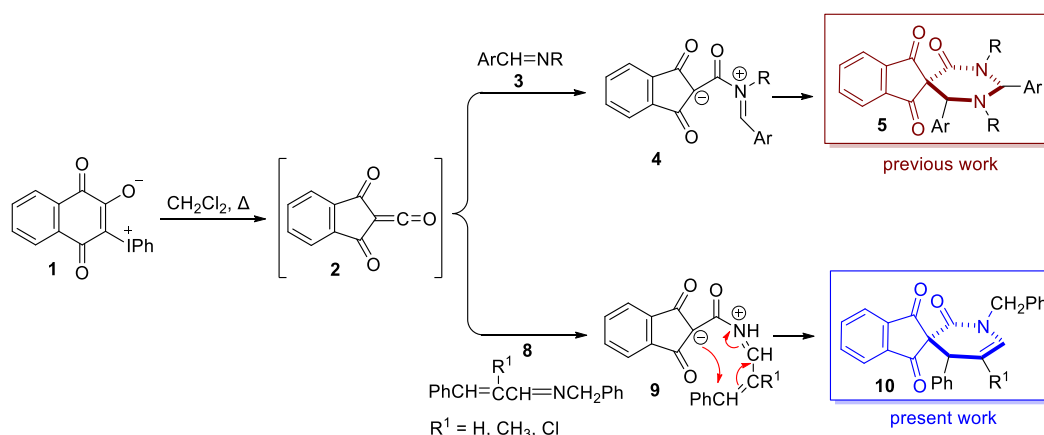
For catalytic processes, an attractive approach is the use of supported catalysts, which offers several advantages on the catalyst reusability and the regio- and chemo-selectivity of the reaction process.¹ Herein we outline a research study aimed into the photo- and thermal catalytic applications of AuNPs and AgNPs heterogeneous systems, in order to afford “green” catalytic chemical redox transformations, towards the synthesis of heterocyclic compounds of high biological interest.^{2,3} Furthermore, new *tris(N-Heterocyclic Thioamidate) Co(III) Complexes*² have been used for the photo-and thermal catalytic development of the synthesis of important biological molecules using common starting materials and under straightforward, one-pot process.^{2,3}

- (a) Mitsudome, T.; Kaneda, K. *Green Chem.* **2013**, *15*, 2636; (b) Stratakis, M.; Garcia, H. *Chem. Rev.* **2012**, *112*, 4469. (c) Corma, A.; Serna, P. *Science* **2006**, *313*, 332. (d)
- (a) Kallitsakis, M. G.; Ioannou, D. I.; Terzidis, M. A.; Kostakis, G. E.; Lykakis, I. N. *Org. Lett.*, **2020**, *22*, 4339. (b) Tzani, M. A.; Gabriel, C.; Lykakis, I. N. *Nanomaterials*, **2020**, *10*, 2045. (c) Tzani, M. A.; Kallitsakis, M. G.; Symeonidis, T. S.; Lykakis, I. N. *ACS Omega*, **2018**, *3*, 16005. (d) D. I. Ioannou, D. K. Gioftsidou, V. E. Tsina, M. G. Kallitsakis, A. G. Hatzidimitriou, M. A. Terzidis, P. A. Angaridis, I. N. Lykakis *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 2895.
- Financial supports from the Hellenic Foundation for Research and Innovation (HFRI) and the General Secretariat for Research and Technology (GSRT) under the grant agreement No[776] “PhotoDaLu” (KA97507).

ΠΟ-30. Θερμικές και καταλυτικές αντιδράσεις παγίδευσης της ινδανδιονοκετένης με α,β -ακόρεστες ιμινο-ενώσεις

Τσοβαλιτζή Ε., Κακάβα Α., Τζάνη Μ., Μαλαμίδου-Ξενικάκη Ε.* και Λυκάκης Ι.*
 Εργαστήριο Οργανικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης,
 Πανεπιστημιούπολη 54124, Θεσσαλονίκη
 *e-mail: malamido@chem.auth.gr; lykakis@chem.auth.gr

Η ινδανδιονοκετένη (**2**) αποτελεί το κύριο ασταθές ενδιάμεσο της *in situ* θερμικής διάσπασης του ιωδωνιο-υλιδίου **1**, η οποία βρέθηκε ότι αντιδρά με μια σειρά από αρυλαλδιμίμες **3**, προς τον σχηματισμό νέων δομικά σπειρανικών παραγώγων **5**. Με βάση τον προτεινόμενο μηχανισμό, τα σπειρανικά αυτά παράγωγα **5**, σχηματίζονται μέσω μιας διαδοχικής [2π+2π+2π] προσθήκης ενός μορίου κετένης και δύο μορίων ιμίνης, πορεία η οποία επιβεβαιώθηκε και με θεωρητικούς υπολογισμούς.^{1,2} Με στόχο τη διεύρυνση του πεδίου συνθετικών εφαρμογών της αντίδρασης αυτής, και επέκταση της σε νέες δομικά σπειρανικές ενώσεις, μελετήθηκαν συνδυαστικά διάφορες θερμικές και καταλυτικές αντιδράσεις του υλιδίου **1** με α,β -ακόρεστες ιμινο-ενώσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στην παρούσα εργασία.



Η αντίδραση του υλιδίου **1** με τις ιμίνες των κινναμωμικών αλδεϋδών **8** ακολούθησε διαφορετική πορεία από αυτή των αρυλαλδιμιμών **3** και έδωσε σε καλές έως εξαιρετικές αποδόσεις (57–90%) τα νέα σπειρανικά παράγωγα **10**, προϊόντα [4π+2π] κυκλοπροσθήκης, όπου το α,β -ακόρεστο ιμινικό τμήμα των **8** συμμετέχει ως 4π συστατικό και ο δεσμός C=C της κετένης ως 2π συστατικό. Σε ηπιότερες συνθήκες, με ανάδευση του υλιδίου και της ιμίνης **8** (R¹ = H) σε rt, παρουσία καταλύτη Au/TiO₂ ή AuCl ή AgNO₃ ή AuCl₃ ή AgOTf, δεν ανιχνεύθηκε προϊόν ανάλογο των **5** ή **10**.

The *in situ* formed indandione ketene is trapped by the α,β -unsaturated imines giving a series of the 1'-H-spiro[indene-2,3'-pyridine]-1,2',3(4'-H)-trione derivatives via a [4π+2π] cycloaddition process. The imines act as the 4π-participants and the C=C bond of indandione ketene as the 2π component.

Βιβλιογραφία

1. Τσοβαλιτζή Ε., Μανωλικάκη Ε., Τζάνη Μ., Μαλαμίδου-Ξενικάκη Ε. και Μπακάλμπασης Ε., Ασυνήθιστες αντιδράσεις παγίδευσης της ινδανδιονοκετένης με ιμίνες μέσω αλληλουχίας αντιδράσεων [2+2+2] κυκλοπροσθήκης. Πειραματική και θεωρητική μελέτη., *Αναρτημένη δημοσίευση – Poster*, 3ο Συνέδριο Χημείας Μεταπτυχιακών και Προπτυχιακών φοιτητών ΑΠΘ, *Νοέμβριος 2019*.
2. Τσοβαλιτζή, Ε., Εφαρμογές της χημείας της 2-υδροξυ-1,4-ναφθοκινόνης και του ιωδωνιο-υλιδίου, *Διδακτορική Διατριβή*, Σελ. 149-165, *Ιούλιος 2019*.

ΠΟ-31. Επίδραση της συγκέντρωσης φορέων φορτίου στο δυναμικό κατάρρευσης των οξειδίων νιοβίου σε διάλυμα ιόντων βρωμίου

Ειρήνη Λάππα, Δήμητρα Σαζού

Εργαστήριο Φυσικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο
Θεσσαλονίκης, Τ.Κ. 54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα
e-mail: lappaeirini@chem.auth.gr

Το Nb και τα οξείδια του παρουσιάζουν μοναδικές φυσικές και χημικές ιδιότητες που τα καθιστούν χρήσιμα σε ένα μεγάλο εύρος εφαρμογών. Συγκεκριμένα το Nb₂O₅ έχει χρησιμοποιηθεί σε συσκευές ανίχνευσης αερίων, σε ηλεκτροχρωμικές συσκευές, σε συσκευές αποθήκευσης ενέργειας καθώς επίσης και ως Βιοϋλικό. Από το 1933 χρησιμοποιείται ευρέως στον τομέα της μεταλλουργίας λόγω της εξαιρετικής σταθερότητας του σε διαβρωτικά περιβάλλοντα. Αυτή του η ανθεκτικότητα οφείλεται στο φυσικό του οξείδιο το οποίο σχηματίζεται ταχέως στην επιφάνεια του μετάλλου ακόμα και στον αέρα. Γενικότερα, η παρουσία παθητικού οξειδίου στην επιφάνεια των μετάλλων ή των κραμάτων λειτουργεί ως φραγμός στην περαιτέρω διάβρωση τους σε υδατικά διαλύματα. Οι ιδιότητες αυτών των παθητικών οξειδίων διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο στην κινητική των ηλεκτροχημικών αντιδράσεων οι οποίες διεξάγονται στη διεπιφάνεια Nb|οξειδίου και οξειδίου|διαλύματος. Συγκεκριμένα οι ατέλειες στην κρυσταλλική τους δομή επηρεάζουν έντονα τις ιονικές και ηλεκτρονικές τους ιδιότητες. Το οξείδιο του Nb έχει n-τύπου ημιαγωγικές ιδιότητες, δηλαδή περίσσεια δοτών φορτίου που συνδέονται κυρίως με την περίσσεια κενών οξυγόνου χωρίς να μπορεί να αποκλειστεί και η παρουσία ενδόθετων κατιόντων Nb. Η πυκνότητα των δοτών φορτίου, Nb φαίνεται να επιδρά στην ανάπτυξη και σταθερότητα του οξειδίου, η οποία εμφανίζεται να είναι ιδιαίτερα ευάλωτη παρουσία ιόντων Βr-που επιδεικνύουν εκλεκτική δραστηριότητα στην παθητική κατάσταση μεταβατικών μετάλλων σε αντίθεση με αυτή άλλων μετάλλων [1]. Στην παρούσα εργασία διερευνήθηκε η επίδραση της Nb στο κρίσιμο δυναμικό κατάρρευσης, E_b, της παθητικής κατάστασης του Nb. Αρχικά σχηματίσθηκε γαλβανοστατικά το Nb₂O₅ σταθερού πάχους, L αλλά διαφορετικής Nb σε 0,5 M H₂SO₄. Η διαφορετική τιμή Nb επιτεύχθηκε με εφαρμογή διαφορετικών τιμών ανοδικού ρεύματος, ενώ το σταθερό L (L~5 nm) καθορίστηκε από το τελικό δυναμικό σχηματισμού, E_f (1,5 V) κατά την γαλβανοστατική ανάπτυξη των οξειδίων. Η Nb για κάθε γαλβανοστατικό οξείδιο εκτιμήθηκε με ανάλυση Mott-Schottky. Στη συνέχεια καταγράφηκαν καμπύλες ρεύματος-δυναμικού σε 0,5 M KBr και προσδιορίστηκε το E_b. Παρατηρήθηκε ότι αρχικά λαμβάνει χώρα μετασταθής σημειακή διάβρωση και εν συνεχεία κατάρρευση της παθητικής κατάστασης του Nb στο E_b, η οποία εκδηλώνεται με εκθετική αύξηση του ρεύματος. Από τις μετρήσεις αυτές προκύπτει ότι το E_b μειώνεται με αύξηση της Nb γεγονός που δείχνει τη συμμετοχή κενών οξυγόνου στον μηχανισμό δράσης των Br.

Βιβλιογραφία:

1. Sazou D, Saltidou K, Pagitsas M. Understanding the effect of bromides on the stability of titanium oxide films based on a point defect model. *Electrochim Acta*. 2012;76:48-61. doi:10.1016/j.electacta.2012.04.158

ΠΟ-32. Σύνθεση και χαρακτηρισμός καινοτόμων νανοσύνθετων πολυεστέρων: συνδυάζοντας νανοάργιλους με τον βιοπροερχόμενο πολυ(2,5-φουρανικό βουτυλενεστέρα)

Αντώνιος Βλαχόπουλος^{α,1}, Λάζαρος Παπαδόπουλος^{α,2}, Ζωή Τερζοπούλου^{α,3}, Παναγιώτης Κλώνος^{α,β,4}, Απόστολος Κυρίτσης^{β,5}, Δημήτριος Τζέτζης^{γ,6}, Γεώργιος Παπαγεωργίου^{δ,7}, Δημήτριος Μπικιάρης^{α,8}.

β: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό Τεχνικό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Πανεπιστημιούπολη Ζωγράφου, 15780 Αθήνα, Ελλάδα

γ: Διεθνές Ελληνικό Πανεπιστήμιο, Σχολή Επιστημών και Τεχνολογίας, Θέρμη, 57001 Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

δ: Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, P.O. Box 1186, GR-45110 Ιωαννίνων, Ελλάδα

¹: **e-mail:** vlachopoulosant@gmail.com

²: **e-mail:** lazaros.geo.papadopoulos@gmail.com

³: **e-mail:** terzoe@gmail.com

⁴: **e-mail:** pklonos@central.ntua.gr

⁵: **e-mail:** akyrits@central.ntua.gr

⁷: **e-mail:** gzpap@uoi.gr

⁸: **e-mail:** dbic@chem.auth.gr

Ο Πολυ (2,5-φουρανικός βουτυλενεστέρας) (PBF) είναι ένας αλειφαρωματικός πολυεστέρας που παράγεται από τα βιοπροερχόμενα μονομερή 2,5-φουρανοδικαρβοξυλικό οξύ (2,5-FDCA) και 1,4-βουτανοδιόλη. Το 2,5-FDCA είναι ένα αρωματικό μονομερές που παράγεται από βιομάζα και είναι εξαιρετικά σημαντικό καθώς θεωρείται ως μια «πράσινη» εναλλακτική του τереφθαλικού οξέος. Για τον λόγο αυτό το 2004 κατατάχθηκε από το Υπουργείο Ενέργειας των ΗΠΑ στα 12 πιο σημαντικά βιοπροερχόμενα μονομερή και έκτοτε οι πολυεστέρες του αποτελούν σημείο διαρκούς έρευνας, στην προσπάθεια αντικατάστασης των πολυεστέρων του τереφθαλικού οξέος που προέρχονται από το πετρέλαιο.

Στην παρούσα εργασία συντέθηκαν νανοσύνθετα του PBF με επιτόπια μέθοδο (in-situ) μετεστεροποίησης και πολυσυμπύκνωσης και ως καταλύτης χρησιμοποιήθηκε το βουτοξείδιο του τιτανίου (IV). Τα νανοσωματίδια που χρησιμοποιήθηκαν ήταν φυσικοί και τροποποιημένοι μοντμοριλλονίτες, οι οποίοι είναι φυλλόμορφα αργιλοπυριτικά σωματίδια, με την εμπορική ονομασία Cloisite 10A, Cloisite 20A και Cloisite 20A Na, τα οποία ενσωματώθηκαν στην βουτανοδιόλη πριν τον πολυμερισμό με χρήση υπερήχων, ώστε να υπάρχει καλή διασπορά τους και στους τελικούς πολυεστέρες. Τα υλικά που παρασκευάστηκαν αξιολογήθηκαν ως προς το μοριακό τους βάρος με χρήση του εσωτερικού ιξώδους και με ¹H-NMR ως προς την δομή τους. Μελετήθηκε επίσης η αλληλεπίδραση του πολυμερούς με τα νανοσωματίδια με περίθλαση ακτινών Χ (XRD), αλλά και οι μεταβολή των θερμικών ιδιοτήτων του πολυμερούς με διαφορική θερμιδομετρία σάρωσης (DSC). Τέλος, μελετήθηκαν και οι μηχανικές ιδιότητες των νανοσύνθετων υλικών στην άμορφη και την κρυσταλλική κατάσταση με την μέθοδο της αντοχής στον εφελκυσμό.

ΠΟ-33. Σύνθεση νέων σύνθετων βιοπολυμερών της χιτοζάνης με προσθήκη κρόκου ή κουρκουμά και μελέτη των ιδιοτήτων τους

Στέφανος Καρκάνης^{α,1} και Δημήτριος Αχιλιάς^{α,2}

^α: Τμήμα Χημείας, Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, GR-54124, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα.

¹: e-mail: skarkanis@chem.auth.gr και stevenkar97@gmail.com

²: e-mail: axilias@chem.auth.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία, πραγματοποιήθηκε σύνθεση υλικών πολυμερικής μήτρας χιτοζάνης, η οποία αποτελεί από τα πιο υποσχόμενα υλικά συσκευασίας, με προσθήκη κρόκου ή κουρκουμά για τη βελτίωση των ιδιοτήτων της χιτοζάνης με τη μέθοδο χύτευσης (solution casting) σε λουτρό υπερήχων. Πραγματοποιήθηκε σύνθεση διαφορετικών δειγμάτων τριών περιεκτικότητας με σκοπό την επίδραση αυτών στις ιδιότητες των συνθέτων. Ένα σύνολο εργαστηριακών τεχνικών, όπως HATR-FTIR, XRD, TGA, χρησιμοποιήθηκαν για τον προσδιορισμό των ιδιοτήτων τόσο του καθαρού φιλμ χιτοζάνης όσο και των σύνθετων υλικών χιτοζάνης με κρόκο ή κουρκουμά αντίστοιχα. Στη συνέχεια μελετήθηκε η αντιοξειδωτική δράση των φιλμ της καθαρής χιτοζάνης και των φιλμ της χιτοζάνης με κρόκο ή κουρκουμά σε τρεις διαφορετικές περιεκτικότητες του προσθέτου αντίστοιχα με τη μέθοδο DPPH και τη χρήση του φασματοφωτόμετρου UV-VIS. Το σύνθετο πολυμερές της χιτοζάνης με μικρή περιεκτικότητα προσθέτου <5% (δείγμα 3%) εμφάνισε βελτιωμένες αντιοξειδωτικές ικανότητες. Το σύνθετο με κρόκο εμφάνισε καλύτερη αντιοξειδωτική δράση από αυτό του κουρκουμά. Τα αποτελέσματα του HATR έδειξαν ότι ο κρόκος και ο κουρκουμάς προσροφήθηκαν στην επιφάνεια της χιτοζάνης. Η μέτρηση XRD επιβεβαίωσε την ύπαρξη παρεμβλλόμενης δομής του σύνθετου υλικού. Η θερμοσταθμική ανάλυση TGA έδειξε ότι η παρουσία των πρόσθετων δεν μεταβάλλει αισθητά την θερμική σταθερότητα της χιτοζάνης εκτός αν πρόκειται για υπερβολικά μεγάλη ποσότητα προσθέτου στο οποίο εμφανίζεται μείωση της θερμικής σταθερότητας. Συνεπώς, η βελτίωση των ιδιοτήτων της χιτοζάνης επιτυγχάνεται με μικρές περιεκτικότητες κρόκου ή κουρκουμά.

ΠΟ-34. Σύνθεση και χαρακτηρισμός υδροπηγμάτων μεθακρυλικών εστέρων της πολυαιθυλενογλυκόλης (PEG) ανταποκρινόμενων σε μεταβολές του pH και της θερμοκρασίας

Στεφανίδου Μυρίκα¹, Αχιλιάς Δημήτριος¹

¹ Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Πολυμερών και Χρωμάτων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124 Θεσσαλονίκη
e-mail: myroforastefanidou@gmail.com

Μια από τις πιο σημαντικές, σύγχρονες κατηγορίες υλικών είναι αυτή των πολυμερών που μπορούν να αποκρίνονται σε εξωτερικά ερεθίσματα, μεταβάλλοντας τις φυσικές τους ιδιότητες με βάση το ερέθισμα. Πολυμερή που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε τέτοιες εφαρμογές είναι οι μεθακρυλικοί εστέρες που έχουν λειτουργικές ομάδες για παράδειγμα αιθυλενογλυκόλης. Τα υλικά αυτά είναι βιοσυμβατά και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως εγγύσιμες υδροπηκτές, βιοισθητήρες, αντιβακτηριακές επιφάνειες, κάψουλες για ελεγχόμενη αποδέσμευση φαρμάκων, κλπ.

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας πραγματοποιήθηκε η σύνθεση τριών ομο-πολυμερών και τριών συμπολυμερών με βάση μεθακρυλικούς εστέρες της πολυαιθυλενογλυκόλης (PEG). Η διαφορά μεταξύ τους εκτός από την ύπαρξη των ολιγοαιθυλενογλυκολικών ομάδων είναι επίσης η ύπαρξη και άλλων λειτουργικών ομάδων, όπως για παράδειγμα υδροξυλίων. Συγκεκριμένα, τα μονομερή που χρησιμοποιήθηκαν ήταν ο μεθυλο-αιθερο-μεθακρυλικός εστέρας της ολιγοαιθυλενο-γλυκόλης, POEGMMA, ο υδροξυ-αιθυλο-μεθακρυλικός εστέρας της ολιγοαιθυλενογλυκόλης με 5 μονάδες αιθυλενοξειδίου, POEGHEMA και ο υδροξυ-αιθυλο μεθακρυλικός εστέρας, PHEMA. Ως τεχνική πολυμερισμού επιλέχθηκε ο πολυμερισμός μάζας με αλυσιδωτό πολυμερισμό ελευθέρων ριζών και ως εκκινήτης της αντίδρασης χρησιμοποιήθηκε το βενζοϋλοϋπεροξείδιο, BPO. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε συμπολυμερισμός αυτών χρησιμοποιώντας σαν δομικές μονάδες τα τρία μονομερή για σχηματισμό τριών νέων συμπολυμερών, $p[(\text{OEGMMA})\text{-co-}(\text{HEMA})]$, $p[(\text{OEGHEMA})\text{-co-}(\text{HEMA})]$ και $p[(\text{OEGMMA})\text{-co-}(\text{OEGHEMA})]$.

Συνολικά στην εργασία παρουσιάζονται αποτελέσματα για 6 διαφορετικές υδρογέλες σε δύο διαφορετικές θερμοκρασίες, μια για τα ομο-πολυμερή (60 °C) και μια ξεχωριστή για τα συμπολυμερή (80°C). Τα τελικά προϊόντα έχουν μορφή υδρογέλης. Οι υδρογέλες, όπως αναφέρθηκε, είναι υλικά με πολλές τεχνολογικές εφαρμογές. Υδρογέλες με βάση την PEG έχουν χαρακτηριστεί από ευαισθησία σε ακραίες τιμές pH και θερμοκρασιών. Για τον λόγο αυτό θα ήταν χρήσιμο να ελέγξουμε την συμπεριφορά των τελικών προϊόντων σε τέτοιες συνθήκες. Για την παραγωγή όξινου διαλύματος χρησιμοποιήθηκε διάλυμα CH_3COOH , ενώ για το αντίστοιχο βασικό διάλυμα, NaOH . Επιπλέον ακολούθησε ο χαρακτηρισμός των έξι πολυμερικών υλικών που παρελήφθησαν. Ο χαρακτηρισμός των υλικών έγινε με την χρήση της Φασματοσκοπίας Υπερύθρου με την τεχνική της αποσβένουσας ολικής ανάκλασης (HATR-FTIR) και με Θερμοσταθμική Ανάλυση (TGA). Τα συμπεράσματα που προκύπτουν μετά το πέρας της σύνθεσης και του χαρακτηρισμού είναι ότι όλα τα προϊόντα έρχονται σε συμφωνία με τις χημικές δομές και τις χημικές ιδιότητες που προκύπτουν από την βιβλιογραφία. Οι υδρογέλες ήταν διαφανείς, με συμπαγή δομή και ελαστομερική συμπεριφορά.

ΠΟ-35. Εκτίμηση της ολικής αντιοξειδωτικής δράσης εδώδιμου αβοκαντελαίου με εφαρμογή της δοκιμής δέσμευσης DPPH• και διερεύνηση της συνεισφοράς επιμέρους συστατικών του

Σταύρος Στεφανίδης¹, Βασιλική Παπώτη², Νικόλαος Νενάδης^{1,3}, Στεργιανή Α. Ορδούδη^{1,3}

¹Εργαστήριο Χημείας και Τεχνολογίας Τροφίμων, Τμήμα Χημείας, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, 54124, Θεσσαλονίκη, ²Perrotis College, Αμερικάνικη Γεωργική Σχολή, 57001, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα, ³Κέντρο Αριστείας Φυσικών Προϊόντων (Nat-Pro), Κέντρο Διεπιστημονικής Έρευνας και Καινοτομίας (ΚΕΔΕΚ), ΑΠΘ, 57001

e-mail: sstefanid@chem.auth.gr, vickyapoti@yahoo.com, niknen@chem.auth.gr, steord@chem.auth.gr

Η παραγωγή εδώδιμου ελαίου από τα υψηλής θρεπτικής αξίας φρούτα αβοκάντο (*Persea americana* Mill.) κερδίζει ολοένα και περισσότερο το ενδιαφέρον της βιομηχανίας καθώς λόγω της ιδιαίτερης σύστασής του φαίνεται να ανταποκρίνεται στις σύγχρονες διατροφικές ανάγκες των καταναλωτών. Η οξειδωτική σταθερότητα αυτών των ελαίων ως βασικό κριτήριο ποιότητάς τους, ελέγχεται συχνά με έκθεση σε δραστικές συνθήκες οξείδωσης που μπορεί να είναι χρονοβόρες και μη ρεαλιστικές. Στο πλαίσιο αναζήτησης απλούστερων, ήπιων και γρήγορων δοκιμών εκτίμησης της αντιοξειδωτικής δράσης, αυτή που στηρίζεται στη φασματοφωτομετρική εκτίμηση της ικανότητας δέσμευσης της ρίζας DPPH• προτείνεται ότι μπορεί να εφαρμοστεί τόσο σε εδώδιμα έλαια ως έχουν, όσο και σε επιμέρους κλάσματά τους [1] προσφέροντας ίσως δυνατότητα πρόβλεψης της οξειδωτικής σταθερότητας των προϊόντων [2]. Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε αυτή η δυνατότητα εφαρμογής της δοκιμής σε δείγματα εμπορικά διαθέσιμου κρητικού αβοκαντελαίου με ιχνηλάσιμα στοιχεία όσον αφορά την ποικιλία, τον τόπο, τη χρονιά ή τη μέθοδο παραγωγής τους καθώς και δείγματα που παράχθηκαν στο πιλοτικό ελαιοτριβείο τύπου Abencor του Εργαστηρίου ΧΤΤ από νωπά φρούτα των δύο κύριων ποικιλιών που καλλιεργούνται στην Κρήτη (cv. Fuerte, Hass). Η δοκιμή DPPH• προσαρμόστηκε κατάλληλα [1] και τα αποτελέσματα εκφράστηκαν ως Ισοδύναμα Trolox (TE, μmol Trolox/L ελαίου). Για την αξιολόγηση των ευρημάτων εξετάστηκε η σύσταση υδατομεθανολικών εκχυλισμάτων σε ολικές πολικές φαινόλες με τη δοκιμή Folin-Ciocalteu (mg γαλλικού οξέος/kg ελαίου) και υδροχρωματογραφικά (RP-HPLC-DAD/FLD), καθώς και το περιεχόμενο του δείγματος σε τοκοφερόλες (HPLC-FLD, mg α-τοκοφερόλης/kg ελαίου). Εκτιμήθηκε επίσης η οξειδωτική σταθερότητα των δειγμάτων σε δραστικές συνθήκες με τη δοκιμή Rancimat (υπολογισμός περιόδου επαγωγής, h) που χρησιμοποιείται ευρέως στον έλεγχο ποιότητας των λιπών και ελαίων. Τα δείγματα βρέθηκε να διαφοροποιούνται σημαντικά ως προς την αντιοξειδωτική δράση τους (32-117,8 TE), κάτι που δε φάνηκε να σχετίζεται με τη σύστασή τους σε πολικές φαινολικές ενώσεις. Τα αποτελέσματα συζητούνται κριτικά ως προς εκείνα για δείγματα παρθένου ελαιολάδου, αλλά και λίπους αβοκάντο μετά από εν ψυχρώ εκχύλιση με ακετόνη τα οποία ήταν ισχυρώς δραστικά ως προς τη DPPH• (~300-400 TE), αλλά και πλούσια σε ολικές πολικές φαινόλες (>300 mg/kg ελαίου).

Βιβλιογραφία:

1. Christodouleas, D.C.; Fotakis, C.; Nikokavoura, A.; Papadopoulos, K.; Calokerinos, A.C. *Food Anal. Methods* **2015**, *8*, 1294–1302.
2. Lee, J.M.; Chung, H.; Chang, P.S.; Lee, J.H.. *Food Chem.* **2007**, *103*, 662–669.

