

# Ύλη Μαθημάτων

## Α' Εξάμηνο

### **A.1. Φυσικά προϊόντα (Υ) (Η. Κουλαδούρος, Μ. Πολυσιού, Β. Κωνσταντίνου, Α. Κυμπάρης)**

1. Εισαγωγή- Χημεία Φυσικών προϊόντων- Μελέτη φυσικών προϊόντων
2. Φαινολικές Ενώσεις
3. Ετεροκυκλικές Ενώσεις
4. Τερπενοειδή - Καροτενοειδή
5. Αιθέρια έλαια
6. Βιοπολυμερή Κυτταρίνες, Ημικυτταρίνες, Πηκτίνες, Λιγνίνες
7. Οργανικά οξέα, Οξέα φυτών, Λιπαρά οξέα κλπ
8. Αλκαλοειδή
9. Στεροειδή, Ορμόνες
10. Οργανοθειούχες ενώσεις
11. Οργανοθειούχες ενώσεις
12. Οργανοθειούχες ενώσεις
13. Οργανοθειούχες ενώσεις

### **A. 2. Παραλαβή διαχωρισμός και απομόνωση φυσικών προϊόντων (Ε) (Π. Ταραντίλης, Β. Κωνσταντίνου, Χ. Παππάς)**

1. Εισαγωγή στη Ανάλυση Φυτικών Φυσικών Προϊόντων
2. Προκατεργασία δείγματος
3. Τεχνικές Παραλαβής Φυσικών Προϊόντων-Τεχνικές Εκχύλισης και Διήθησης
4. Τεχνικές Παραλαβής Φυσικών Προϊόντων-Τεχνικές Απόσταξης
5. Διαχωρισμός - Απομόνωση φυσικών προϊόντων με χρωματογραφικές τεχνικές
6. Διαχωρισμός - Απομόνωση φυσικών προϊόντων με χρωματογραφικές τεχνικές- Αεριοχρωματογραφικές τεχνικές.
7. Φασματομετρία μαζών - Αεριοχρωματογραφικές τεχνικές συζευγμένες με φασματοσκοπικές τεχνικές.
8. Διαχωρισμός - Απομόνωση φυσικών προϊόντων με χρωματογραφικές τεχνικές- Υγροχρωματογραφικές τεχνικές -Υγροχρωματογραφικές τεχνικές συζευγμένες με φασματοσκοπικές τεχνικές
9. Αέρια Χρωματογραφία Φασματομετρία μαζών & Υγρή Χρωματογραφία - Φασματομετρία μαζών: εργαστηριακή πρακτική
10. Εφαρμογές:
11. Τερπενοειδή (αιθέρια έλαια, διτερπενοειδή, , τριτερπενοειδή, καροτενοειδή).
12. Φαινολικές ενώσεις (φαινόλες-φαινολικά οξέα, φλαβονοειδή, φλαβονόλες, φλαβόνες, ανθοκυάνες, κινόνες).
13. Στεροειδή (στερόλες, χολικά οξέα, στεροειδείς ορμόνες).
14. Αλκαλοειδή (ομάδες της φαινυλαιθυλαμίνης, πυρρολιδίνης, πυριδίνης, πιππερίνης, κινολίνης, ισοκινολίνης, φαινανθρενίου, ινδολίου).

### **A.3. Μέθοδοι ανάλυσης φυσικών προϊόντων (Ε) (Κ. Γεωργίου, Π. Ταραντίλης, Χ. Παππάς)**

1. Αναλυτές διάκριτων αναλύσεων
2. Αναλυτές αεροδιαχωριζόμενης ροής εισαγωγή σε fluidics
3. Flow sequential and bead injection –lab on valve
4. Process analysers
5. Εισαγωγή σε microarrays genes and genomes
6. Επιφάνειες microarray
7. Targets and probes
8. Ανίχνευση και informatics
9. Κατασκευή microarrays
10. Κατασκευή microarrays
11. Ποσοτικοί μέθοδοι ανάλυσης με τη χρήση Αεριοχρωματογραφικών μεθόδων
12. Ποσοτικοί μέθοδοι ανάλυσης με τη χρήση Υγροχρωματογραφικών μεθόδων
13. Εφαρμογές της FT-IR στην ανάπτυξη αυτοποιημένων μεθόδων ανάλυσης

#### **A.4. Πιστοποίηση της ποιότητας και αυθεντικότητας φυσικών προϊόντων (Ε) (Σ. Χαρουτουγιάν**

##### **Π. Ταραντίλης, Ε. Δροσινός)**

#### **A.5. Εφαρμοσμένη στατιστική – Χημειομετρία (στατιστική ανάλυση δεδομένων) (Ε) (Γ. Παπαδόπουλος)**

- 1) Στατιστικά πακέτα (τι προσφέρουν, κοινά χαρακτηριστικά, πώς τα χρησιμοποιούμε).
- 2) Σύντομη επισκόπηση βασικών θεμάτων στατιστικής συμπερασματολογίας:
  - Στατιστική σημαντικότητα.
  - Διαστήματα εμπιστοσύνης (α) για τον μέσο ενός πληθυσμού (β) για τη διαφορά των μέσων δύο πληθυσμών με ανεξάρτητα δείγματα και με ζευγαρωτές παρατηρήσεις (γ) για το ποσοστό ενός (διωνυμικού) πληθυσμού δ) για τη διαφορά δύο ποσοστών ε) για τη διακύμανση ενός πληθυσμού στ) για το λόγο των διακυμάνσεων δύο πληθυσμών.
  - Στατιστικοί έλεγχοι (α) για τον μέσο ενός πληθυσμού (β) για τη σύγκριση των μέσων δύο πληθυσμών με ανεξάρτητα δείγματα και με ζευγαρωτές παρατηρήσεις (γ) για το ποσοστό ενός (διωνυμικού) πληθυσμού και (δ) για τη σύγκριση δύο ποσοστών ε) για τη διακύμανση ενός πληθυσμού στ) για το λόγο των διακυμάνσεων δύο πληθυσμών.
  - Ανάλυση διακύμανσης (α) με έναν παράγοντα (β) με δύο παράγοντες με και χωρίς αλληλεπίδραση. Έλεγχοι πολλαπλών συγκρίσεων.
  - Έλεγχος  $\chi^2$  (καλής προσαρμογής, ανεξαρτησίας).
- 3) Πώς γίνεται ο έλεγχος των αναγκαίων για την εφαρμογή των παραμετρικών στατιστικών ελέγχων υποθέσεων/παραδοχών.
  - Έλεγχοι κανονικότητας ενός πληθυσμού (Kolmogorov-Smirnov test, Anderson-Darling test, κτλ.).
  - Έλεγχοι ισότητας διασπορών (Bartlett test, Cochran test, κτλ.).
  - Διαγράμματα υπολοίπων, Normal probability plot κτλ..
- 4) Τι επιλογές έχουμε στις περιπτώσεις που δεν ικανοποιούνται οι αναγκαίες για την εφαρμογή των παραμετρικών στατιστικών ελέγχων υποθέσεις/παραδοχές.
  - Μη παραμετρικοί έλεγχοι (Sign test, Mann-Whitney test, Wilcoxon test, Kruskal-Wallis test, Friedman test, κτλ.).
- 5) Ανάλυση παλινδρόμησης

- Απλή γραμμική παλινδρόμηση και συσχέτιση.
  - Πολλαπλή παλινδρόμηση και συσχέτιση.
  - Λογιστική παλινδρόμηση.
- 6) Αποκλίσεις από τις υποθέσεις του γραμμικού μοντέλου.
- Διαγράμματα υπολοίπων για την ανίχνευση αποκλίσεων.
  - Μη γραμμικά μοντέλα και μετασχηματισμοί δεδομένων.

#### **A.5. Τεχνικές ελέγχου βιοδραστικότητας (E) (Π. Ταραντίλης, Χ. Παππάς, Ε. Πανάγου)**

1. Εισαγωγή
2. Ολικά φαινολικά
  - 2.1. Μέθοδος Folin-Ciocalteu
3. Αντιοξειδωτική δράση
  - 3.1. Μέθοδοι μηχανισμού μεταφοράς ατόμου υδρογόνου (Hydrogen Atom Transfer, HAT),
  - 3.2. Μέθοδοι μηχανισμού μεταφοράς μονήρους ηλεκτρονίου (Single Electron Transfer, SET).
  - 3.3. Μέθοδος DPPH
  - 3.4. Μέθοδος ABTS
4. Αντιμικροβιακή δράση
5. Αντιμικροβιακή δράση
6. Αντιμικροβιακή δράση
7. Αντιμικροβιακή δράση
8. Αντιμικροβιακή δράση
9. Αντιμικροβιακή δράση
10. Τοξικότητα
 

Μέθοδος MICROTOX
11. Εντομοαπωθητική Εντομοελκυστική δράση
12. Ζιζανιοκτόνος δράση
13. Αλληλοπάθεια

## **Β' Εξάμηνο**

### **Β.1. Ταυτοποίηση της δομής φυσικών προϊόντων (Υ) (Χ. Παππάς, Π. Ταραντίλης, Β. Κωνσταντίνου, Μ. Πολυσίου)**

1. Εισαγωγή
2. Φασματοσκοπία απορρόφησης –UV-Vis
3. Φθορισμομετρία, Χημειο-& Βιο-φωταύγεια
4. Φασματοσκοπία υπερύθρου (FT-IR)
5. Φασματοσκοπία FT-Raman
6. Φασματοσκοπία υπερύθρου & Raman (FT-IR & Raman) ( Ε)
7. Φασματοσκοπία  $^1\text{H}$  NMR
8. Φασματοσκοπία  $^{13}\text{C}$  NMR
9. Παραδείγματα προσδιορισμού δομής
10. Παραδείγματα προσδιορισμού δομής
11. Εφαρμογές
12. Εφαρμογές
13. Εφαρμογές

### **Β.2. Σχεδιασμός και σύνθεση φυσικών μεταβολιτών και παραγώγων τους (Ε) (Η. Κουλαδούρος**

#### **Β. Κωνσταντίνου, Μ. Πολυσίου)**

1. Βιολογικά, φυσικά και συνθετικά προϊόντα: νομοθεσία και πραγματικότητα.
2. Κατανόηση της δράσης των Φυσικών Προϊόντων (Φ.Π.) σε μοριακό επίπεδο.
3. Βελτίωση της δράσης των Φ.Π. με χημικές μετατροπές.
4. Κατανόηση των βασικών αρχών της Οργανικής Χημείας (Μέρος Α')
5. Κατανόηση των βασικών αρχών της Οργανικής Χημείας (Μέρος Β')
6. Σύγχρονες τάσεις της φαρμακοβιομηχανίας για την εκμετάλλευση των Φ.Π..
7. Παραδείγματα φαρμάκων ευρείας κυκλοφορίας προερχόμενα από Φ.Π. (Μέρος Α').
8. Παραδείγματα φαρμάκων ευρείας κυκλοφορίας προερχόμενα από Φ.Π. (Μέρος Β').

### **Β.3. Προσδιορισμός στερεοχημικής δομής φυσικών προϊόντων με κρυσταλλογραφία ακτίνων-Χ. Εγκλεισμός φυσικών προϊόντων (Ε) (Κ. Μπεθάνης)**

1. Εισαγωγή στην κρυσταλλική κατάσταση της ύλης
2. Θεωρία περίθλασης ακτίνων-Χ από μονοκρύσταλλο
3. Συλλογή και επεξεργασία δεδομένων περίθλασης ακτίνων-Χ από μονοκρύσταλλο
4. Προσδιορισμός κρυσταλλικής δομής – το πρόβλημα των φάσεων
5. Βελτιστοποίηση κρυσταλλικής δομής – Έλεγχος τελικού μοντέλου
6. Εισαγωγή στην Υπερμοριακή Χημεία (Βασικές Αρχές, ορολογία, ορισμοί, παραδείγματα υπερμοριακών συστημάτων)
7. Διαμοριακές αλληλεπιδράσεις
8. Χημεία Μοριακής αναγνώρισης (Ξενιστή – Ξενιζομένου)
9. Κυκλοδεξτρίνες - προϊόντα εγκλεισμού με κυκλοδεξτρίνες
10. Κρυσταλλογραφική ανάλυση – στερεοχημική δομή υπερμοριακών συστημάτων

11. Βάσεις δομών βιομορίων – μελέτη ηλεκτρονικών αρχείων δομής
12. Ανάλυση και μελέτη της νανοαρχιτεκτονικής υπερμοριακής αυτο-οργάνωσης. Εισαγωγή στη Βιονανοτεχνολογία.

#### **B.4. Υπολογιστικές μέθοδοι για τη μελέτη δομής - δράσης βιοδραστικών ουσιών - μοριακή μηχανική (Ε) (Κ. Μπεθάνης Η. Ηλιόπουλος)**

1. Εισαγωγή – Οι δομές των βιομορίων – Μέθοδοι προσδιορισμού
2. Υπέρθυση δομών στο χώρο και γεωμετρική ανάλυση
3. Προτυποποίηση (modelling) της στερεοδιάταξης βιοδραστικών ουσιών με μοριακή μηχανική και δυναμική
4. Αλληλεπιδράσεις μεταξύ βιομορίων: κατηγορίες αλληλεπίδρασης μεταξύ βιοδραστικών ουσιών και πρωτεϊνών ή νουκλεϊκών οξέων
5. Μοριακή Αναγνώριση: Σταθερές σύνδεσης και αποχωρισμού, Ενέργεια σύνδεσης, Παράδειγμα Μοριακής Αναγνώρισης, Τρόποι σταθεροποίησης εγκλεισμένων ιοντικών φορτίων. Εντροπικοί όροι στη δημιουργία συμπλοκών. Βαθμοί Μοριακής Αναγνώρισης-Αναγνώριση Υψηλής Πιστότητα.
6. “Έλλιμενισμός” (docking) υποκαταστατών (ligands) σε πρωτεΐνες.
7. Ενεργειακή ανάλυση αλληλεπιδράσεων: Μοριακή Μηχανική. Η Εμπειρική συνάρτηση Δυναμικής Ενέργειας, Ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας.
8. Οι επιφάνειες δυναμικής ενέργειας. Ενθαλπία και Εντροπία. Μοριακή Δυναμική.
9. Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, υπολογισμός και ανάλυση γεωμετρικών μεγεθών. Μέθοδος διαταραχής της ελεύθερης ενέργειας υπερμοριακού συστήματος
10. Βιολογικές Μεμβράνες και Μεμβρανικές Πρωτεΐνες: Σύνθεση και δομή βιολογικών μεμβρανών. Μεμβρανικές πρωτεΐνες. Κανάλια και υποδοχείς.
11. Σχεδιασμός Φαρμάκων: Μεθοδολογία, Σχεδιασμός φαρμάκων με βάση την δομή του στόχου.
12. Χημική Μεταβίβαση Σήματος: Συνήθεις μοριακοί μηχανισμοί για μεταβίβαση σημάτων. Ορμόνες, νευρομεταδότες, τοπικοί χημικοί μεσολαβητές, Μεταβίβαση σήματος στις μεμβράνες και το κυτόπλασμα.

#### **B.5. Αρωματικά και φαρμακευτικά φυτά – (Καλλιέργεια – Συγκομιδή – Μεταποίηση – Εμπορική Εκμετάλλευση) (Ε) (Γ. Οικονόμου, Π. Ταραντίλης, Μ. Πολυσίου)**

1. Εισαγωγή: Ιστορική Αναδρομή- Η παγκόσμια, ευρωπαϊκή και ελληνική πραγματικότητα – Προοπτικές του κλάδου.
2. Αρωματικά και φαρμακευτικά φυτά με οικονομικό ενδιαφέρον.
3. Σχεδιασμός και εγκατάσταση καλλιέργειας αρωματικών και φαρμακευτών φυτών
4. Εγκατάσταση καλλιέργειας
5. Αειφόρος διαχείριση της παραγωγής Α/Φ φυτών
6. Κώδικες Ορθής Πρακτικής για την καλλιέργεια και τη συγκομιδή
7. Εφαρμογή της βιολογικής γεωργίας στα αρωματικά και φαρμακευτικά φυτά.
8. Συλλογή-συγκομιδή
9. Συντήρηση – αποθήκευση του φυτικού υλικού

10. Παραλαβή δραστικών συστατικών αρωματικών και φαρμακευτικών
11. Εμπορία αρωματικών και φαρμακευτικών φυτών
12. Επενδυτικά σχέδια. Οικονομοτεχνικές μελέτες. Ισχύον επενδυτικό πλαίσιο.
13. Παραδείγματα επιχειρηματικής δράσης στον τομέα των αρωματικών και φαρμακευτικών φυτών

**B.6. Χρήσεις φυσικών προϊόντων (Λειτουργικά τρόφιμα, φυσικά συντηρητικά, αγροχημικά, εκμετάλλευση παραπροϊόντων κλπ) (Ε) (Σ. Χαρουτουιάν, Π. Ταραντίλης)**

**B.7. Μη στοχευμένη ανάλυση (Ε) (Κ. Γεωργίου, Π. Ταραντίλης, Χ. Παππάς)**