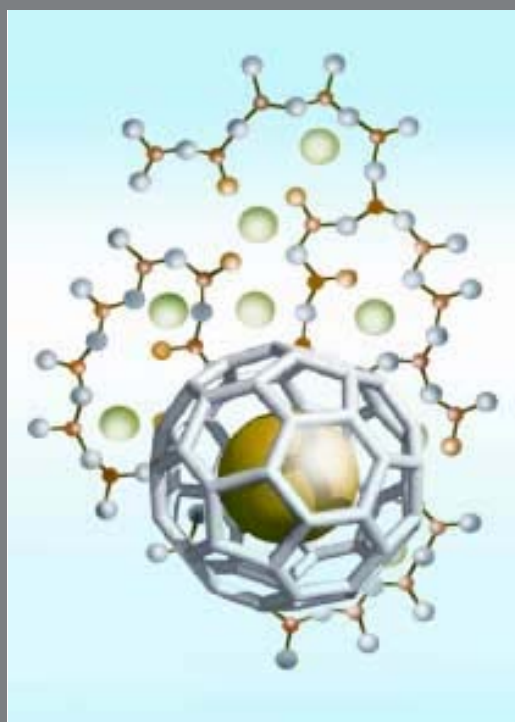


ΕΘΝΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΕΡΕΥΝΩΝ



1958-2008

*Ινστιτούτο  
Θεωρητικής  
& Φυσικής  
Χημείας  
ΙΘΦΧ*

*Διευθυντής  
Ευστράτιος Ι. Καμίτσος*

## Τα πρώτα χρόνια (1968-1975)

Η ίδρυση του πρώτου ερευνητικού Κέντρου Φυσικών Επιστημών στο τότε Βασιλικό Ίδρυμα Ερευνών (BIE) – που αποτελούσε τον μοναδικό οργανισμό χρηματοδότησης της έρευνας στη χώρα και όπου λειτουργούσαν ήδη το ΚΝΕ και το ΚΒΕ – έχει τις ρίζες της σε μακρόχρονες προσπάθειες των Ακαδημαϊκών Λεωνίδα Ζέρβα και Καίσαρα Αλεξόπουλου, καθηγητών Χημείας και Φυσικής, αντίστοιχα, στο Πανεπιστήμιο Αθηνών. Ήδη από τον Μάρτιο του 1963, ο πρώτος έχει υποβάλει στο Διοικητικό Συμβούλιο *Σημείωμα* στο οποίο εισηγείται την άμεση ίδρυση Κέντρων Ερευνών Φυσικών Επιστημών (ΚΕΦΕ), παράλληλα με την ανέγερση του κτηρίου. Πρόθεσή του είναι να επαναπατρίσει «διακεκριμένους Έλληνες επιστήμονες του Εξωτερικού». Προτείνει ως πιθανούς υποψήφιους Διευθυντές τον Γεώργιο Καραγκούνη (Freiburg), τον Χαράλαμπο Γάτο (MIT) ή τον Σπυρίδωνα Αλιβιζάτο (Chicago), και προσφέρεται να διεξαγάγει με αυτούς «λεπτές φύσεως διαπραγματεύσεις επί του προβλήματος του επαναπατρισμού». Για να αντιμετωπίσει το πρόσθετο κόστος ζητά την εγγραφή στον προϋπολογισμό «ειδικού κονδυλίου δια το BIE» και σχεδιάζει την προσέλκυση πόρων και εξοπλισμού

από το Ford Foundation και το Rockefeller Foundation. Στη χειρότερη περίπτωση, είναι διατεθειμένος να ζητήσει να εξασφαλιστεί μέρος του αναγκαιούντος δια την λειτουργείαν των ΚΕΦΕ ποσού δι' αντιστοίχου περιορισμού της χορηγούμενης εις [εξωτερικούς] ερευνητάς βοήθειας.

Η τελευταία αυτή αναφορά έχει τη σημασία της γιατί ενδέχεται να σηματοδοτεί, τουλάχιστον σε ό,τι αφορά τις θετικές επιστήμες, την αρχή ενός υπέρποντος ανταγωνισμού μεταξύ των εσωτερικών Κέντρων του BIE και των πανεπιστημιακών ερευνητών, οι οποίοι μέχρι τότε ήταν οι αποκλειστικοί αποδέκτες των επιχορηγήσεων του Ιδρύματος. Οι αντιδράσεις εκφράζονται εύγλωττα στη συνεδρία του ΔΣ της 31ης Μαΐου 1966 («υπό την Προεδρίαν της Α.Μ. του Βασιλέως Κωνσταντίνου»), στην οποία εγκρίνεται κατ' αρχήν το «Σχέδιον Ιδρύσεως και Λειτουργίας Κέντρων Ερευνών Φυσικών Επιστημών». Ο τότε βασιλιάς ζητά να εξακολουθήσει η βοήθεια προς τα πανεπιστήμια, ενώ ο στενός συνεργάτης του, υποπτεράρχος Χαράλαμπος Ποταμιάνος, μέλος του ΔΣ, υποβάλλει γραπτώς τις αντιρρήσεις του: *Εάν το σχέδιον γίνη αποδεκτόν ως έχει, το BIE θα διακινδυνεύ-*



Γεώργιος Α. Καραγκούνης (1905-1990), καθηγητής Φυσικοχημείας στα Πανεπιστήμια Αθηνών, Ζυρίχης και Φράμπουργκ. Αντεπιστέλλον μέλος της Ακαδημίας Αθηνών από το 1966 και τακτικό από το 1984. Υπήρξε πολυσχιδής προσωπικότητα και από τους σκαπανείς της επιστημονικής έρευνας στην Ελλάδα. Στο τέλος της σταδιοδρομίας του επελέγη από το ΔΣ του τότε ΒΙΕ ως Διευθυντής του Κέντρου Φυσικοχημείας, στο οποίο εργάστηκε από το 1968 έως το τέλος του 1975. Στη φωτογραφία, που χρονολογείται από την εποχή του Φράμπουργκ, δεύτερος από δεξιά, με το βλέμμα στον φακό, σε συνάντηση με τον C.V. Raman, θεμελιωτή της ομώνυμης φασματοσκοπικής τεχνικής.

● 150

ση την εμπλοκήν εις περιπέτειαν λίαν αβεβαίας επιτυχίας. Φαίνεται ότι διαφωνεί γενικώς με την ανάληψη των υποχρεώσεων που συνεπάγεται η ίδρυση υπαλληλικών οργανισμών με καθωρισμένον προσωπικόν, οι οποίοι θα οφείλουν να παρουσιάσουν έργον δια να δικαιολογήσουν την ύπαρξίν των, ιδίως όταν λείπουν οι μηχανισμοί αποτίμησης αυτού του έργου. Αντιπροτείνει τη διάθεση των εργαστηρίων δι' εκτέλεσιν ειδικής εκάστοτε ερεύνης εις τας Πανεπιστημιακάς Σχολάς, εάν αύται δεν διαθέτουν τας εγκαταστάσεις, και εφ' όσον η έρευνα κρίνεται υπό του ΒΙΕ ως αξιόλογος.

Στο μεταξύ, οι διαπραγματεύσεις του Α. Ζέρβα για την εξεύρεση Διευθυντή έχουν συγκλίνει στο πρόσωπο του Γεωργίου Καραγκούνη, ο οποίος αντιμετωπίζει ευμενώς περίπτωσιν επαναπατριισμού, επιθυμεί όμως όπως το κράτος αποκαταστήσει τούτον κατά τινά τρόπον ηθικώς. Το 1966, ο Γ. Καραγκούνης εκλέγεται αντεπι-

στέλλον μέλος της Ακαδημίας Αθηνών. Το πρώτο ΚΕΦΕ θα οργανωθεί δύο χρόνια αργότερα γύρω από τη δική του ισχυρή επιστημονική προσωπικότητα και θα ονομαστεί Κέντρο Φυσικοχημείας. Ο Γ. Καραγκούνης υπογράφει σύμβαση οκταετούς διάρκειας και αναλαμβάνει τα καθήκοντά του –στο ολοκαίνουριο κτήριο του ΒΙΕ– στα τέλη Φεβρουαρίου του 1968.

Το Κέντρο Φυσικοχημείας αρχίζει να εξοπλίζεται και να λειτουργεί ερευνητικά. Φθάνουν μεταχειρισμένα, από τη Γερμανία, το φωτόμετρο Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR) A-60A της Varian με ολοκληρωτή C-1024, καθώς και το φωτόμετρο υπερύθρου Beckman IR-9. Μέχρι το 1970, αγοράζονται από τον προϋπολογισμό του ΒΙΕ το πρώτο laser στην Ελλάδα (Spectra Physics 125, He-Ne, 150 mW) και ένας διπλός μονοχρωμάτορας της Jarrell-Ash, για να στηθεί το πρώτο φωτόμετρο Raman. Οι μοναδικές πειραματικές δυνατότητες προσελκύουν αξιόλογους νέους επιστήμονες.

Τρεις νέοι χημικοί και μία φυσικός ολοκληρώνουν τις διδακτορικές τους διατριβές στο Κέντρο υπό την επίβλεψη του Γ. Καραγκούνη. Είναι ο Γιώργος Κ. Παπαβασιλείου (*Laser-Raman φάσματα ουσιών εν προσροφήσει*, 1972), η Βάννα Πανδη-Αγαθοκλή (*Περί μιας μεθόδου συνθέσεως κατενανίων*, 1972), ο Γιώργος Μακρογιάννης (*Περί μιας εξαρτήσεως της εντάσεως των γραμμών Raman εκ της παρουσίας παραμαγνητικών ουσιών*, 1974) και, αργότερα, η Ρέα Παλαιοπούλου (*Σπουδαί επί των δυνάμεων αμοιβαίας δράσεως μεταξύ διλειτουργικών αφ' ενός και δακτυλικών ενώσεων αφ' ετέρου δια της μεθόδου πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού - NMR*, 1978).

Η πρώτη δημοσίευση του Κέντρου Φυσικοχημείας εμφανίζεται στο περιοδικό *Nature* τον Φεβρουάριο του 1969, υπογράφεται από τον Γ. Καραγκούνη, τον Ε. Παπαγιαννάκη και την Χ. Στασινοπούλου και αφορά τη μελέτη μοριακών μονοστιβάδων οργανικών ενώσεων προσροφημένων σε μικροσωματίδια πυριτίας. Το φωτόμετρο NMR χρησιμοποιείται για να μετρήσει το εξαιρετικά ασθενές σήμα των οργανικών ενώσεων και τη μεταβολή του συναρτήσει της θερμοκρασίας. Το εύρος των ταινιών που καταγράφονται μετά από επίπονη συλλογή είναι ανάλογο της κινητικότητας των μορίων στην επιφάνεια. Τα δεδομένα δείχνουν ότι υπ' αυτές τις συνθήκες η τήξη επέρχεται σε σημαντικά χαμηλότερες θερμοκρασίες. Αργότερα, στα πλαίσια της διατριβής του, ο Γ. Κ. Παπαβασιλείου επανέρχεται στο ίδιο θέμα, ανιχνεύοντας τις ίδιες αλληλεπιδράσεις με φασματοσκοπία Raman.

Οι επιστημονικές δημοσιεύσεις της περιόδου, στα Πρακτικά της Ακαδημίας Αθηνών και στα Χημικά Χρονικά, χαρακτηρίζονται από πρωτοτυπία και τόλμη. Διερευνάται η σύνθεση πολυκατενανίων -ενώσεων που αποτελούνται από συνδεδεμένους κρίκους, όπως σε μία αλυσίδα. Το κρίσιμο συνθετικό στάδιο είναι το κλείσιμο του κρίκου, και επιτυγχάνεται με την ακινητοποίηση του μορίου στη μεσεπιφάνεια υδρόφοβου και υδρόφιλου διαλύτη.



Η πρώτη δημοσίευση του Κέντρου Φυσιχοημείας. Παρουσιάστηκε το 1969 στο περιοδικό Nature και αφορά τον πειραματικό προσδιορισμό του σημείου τήξης υλικών εν προσορήσει με φασματοσκοπία Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR). Υπογράφεται από τον Γεώργιο Καραγκούνη, Διευθυντή του Κέντρου, και τους τότε συνεργάτες του Λευτέρη Παπαγιαννάκη (σήμερα καθηγητή στο ΕΜΠ) και Χαρίκλεια Στασινοπούλου (μετέπειτα ερευνήτρια στον «Δημόκριτο»).

Αλλά το επιστημονικό εγχείρημα χάνει σημαντικό τμήμα από την αρχική του δυναμική σε διοικητικές αντιπαραθέσεις και εσωστρέφεια. Ενδεικτικό του κλίματος που επικρατεί τον Σεπτέμβριο του 1975, λίγους μόλις μήνες πριν την επικείμενη λήξη της θητείας του Γ. Καραγκούνη, είναι ότι συζητείται στο ΔΣ η «εν γένει κατάργησις του Κέντρου Φυσιχοημείας». Η ιστορία μας θα μπορούσε θεωρητικά να έχει τελειώσει εδώ. Και όμως, όπως θα δείξει η συνέχεια, το τρένο έχει ήδη μπει στις ράγες.

### Κέντρο Φυσιχοημείας-Φασματοσκοπίας και Κέντρο Θεωρητικής Χημείας (1976-1979)

Παρά τις αρχικές δυσκολίες, είναι φανερό ότι αυτό καθαυτό το εγχείρημα της δημιουργίας των ΚΕΦΕ έχει ανοίξει ένα νέο, μη αναστρέψιμο, δίαυλο επαναπατρισμού σε διακεκριμένους Έλληνες επιστήμονες του εξωτερικού. Ήδη τον Νοέμβριο του 1975, ο Λ. Ζέρβας παραδίδει στο ΔΣ «προς ιδιαίτερα μελέτη» το βιογραφικό σημείωμα του Θεόφιλου Θεοφανίδη, καθηγητή Χημείας στο Πανεπιστήμιο του Montreal, και ταυτόχρονα ανακοινώνει την κατ' αρχήν επιθυμία του νεαρού καθηγητή του Παν. Yale Κλεάνθη Νικολαΐδη περί προσλήψεώς του εις το καθ' ημάς Ίδρυμα ως Διευθυντής Κέντρου. Ένα μήνα μετά, ο πρώτος έχει αποδεχθεί «την θέσιν Διευθυντού του Κέντρου Φυσιχοημείας-Φασματοσκοπίας», και ο δεύτερος «την θέσιν Διευθυντού Κέντρου ασχολουμένου με ζητήματα Θεωρητικής Χημείας». Οι νέοι Διευθυντές δεν θα υπογράψουν συμβάσεις πριν το καλοκαίρι του 1976, διαπραγματευόμενοι πρόσθετα κονδύλια για την αγορά εξοπλισμού και την πρόσληψη προσωπικού. Τα δύο Κέντρα, θα λειτουργήσουν παράλληλα μέχρι το καλοκαίρι του 1979, ακολουθώντας αρκετά διαφορετικές πορείες.

Εξειδικεύοντας την ονομασία του, το Κέντρο Φυσιχοημείας-Φασματοσκοπίας επιχειρεί να αποκτήσει μία σαφέστερη επιστημονική ταυτότητα, η οποία προβάλλεται ότι θα τεθεί στην υπηρεσία της εγχώριας οικονομίας. Η στελέχωση, όμως, του Κέντρου είναι σαφώς περιορισμένη. Η μετάκληση του Γιώργου Παπαθεοδώρου από το Argonne National Lab των ΗΠΑ, αποφασίζεται αλλά δεν υλοποιείται ποτέ. Ο νεοπροσληφθείς ερευνητής Αρυστείδης Τερζής (μετέπειτα ερευνητής στον «Δημόκριτο»), καθώς και ο Θ. Θεοφανίδης έχουν ακόμη διδακτικά καθήκοντα στον Καναδά για κάποια χρονικά διαστήματα.

τα. Το Κέντρο λειτουργεί ουσιαστικά με ερευνητές τους διδάκτορες Γιώργο Κ. Παπαβασιλείου, Βάννα Πανδή και Γιώργο Μακρυγιάννη, πρώην συνεργάτες του Γ. Καραγκούνη. Ο Πασχάλης Μποδάκος και η Έφη Κονταράκη επικουρούν ως παρασκευαστές.

Χάρη στην επιμονή του Θ. Θεοφανίδη, το Κέντρο διαθέτει πλέον ένα νέο φωτόμετρο Raman τελευταίας τεχνολογίας με διπλό μονοχρωμάτορα (HG 2S της Jobin Yvon) που χρησιμοποιεί το laser Αργού Spectra Physics 165. Το νέο laser προσφέρει πολλές γραμμές διέγερσης από το βαθύ μπλέ έως το πράσινο και ανοίγει νέες ερευνητικές δυνατότητες.



Τα δύο πρώτα φωτόμετρα Raman του Κέντρου Φυσικοχημείας. Επάνω, το φωτόμετρο Jarrrell-Ash που αγοράστηκε το 1970. Δεξιά, διακρίνεται η κεφαλή του πρώτου laser στην Ελλάδα. Κάτω, ο Γιώργος Κ. Παπαβασιλείου μπροστά στο φωτόμετρο της Jobin Yvon με το laser Αργού, που αποκτήθηκαν το 1977.

Στο πεδίο των ιδεών, εισάγεται η μελέτη συμπλόκων του λευκοχρύσου. Σχεδιασμένα κατ' αρχήν ως πιθανά αντικαρκινικά φάρμακα, τα σύμπλοκα αυτά ανοίγουν νέους και μη αναμενόμενους ερευνητικούς δρόμους στο πεδίο των μονοδιάστατων υλικών. Σε μια από τις σημαντικότερες δημοσιεύσεις της περιόδου, οι Παπαβασιλείου, Θεοφανίδη και Ραφομανίχη καταδεικνύουν με φασματοσκοπία συντονισμού Raman την οπτική ανισοτροπία των νέων ενώσεων (απορροφούν έντονα φως πολωμένο κατά μήκος της αλυσίδας λευκοχρύσου-αλογόνου, αλλ' όχι κάθετα σε αυτήν). Υπό την επίβλεψη του Γ. Κ. Παπαβασιλείου, ο Daranidar Layek ξεκινά το διδακτορικό του (Σύνθεση και οπτικές ιδιότητες καινούργιων μονοδιάστατων ενώσεων του λευκοχρύσου, παλλαδίου και νικελίου) που θα ολοκληρωθεί το 1981. Στα χρόνια που ακολουθούν, ο Γ. Κ. Παπαβασιλείου θα επεκταθεί στη σύνθεση και μελέτη συνθετικών χαμηλοδιάστατων υλικών, που συνδυάζουν ανόργανα και οργανικά μέρη και διαθέτουν ημιαγωγικές, αγώγιμες ή υπεραγωγικές ιδιότητες. Η πρωτοποριακή και μεθοδική δουλειά του θα χαρακτηρίζει για πολλά χρόνια την πειραματική δραστηριότητα στο Κέντρο.

Στο νεοσύστατο Κέντρο Θεωρητικής Χημείας (ΚΘΧ), ο Κλ. Νικολαΐδης εισάγει στην Ελλάδα τον κλάδο της Θεωρητικής Χημείας και αντιμετωπίζει την έλλειψη στελεχών και υπολογιστικής υποδομής. Εισηγείται και πετυχαίνει τη μετάκληση από τις ΗΠΑ του Donald Beck, ο οποίος θα εργασθεί στο ΚΘΧ από τον Οκτώβριο του 1976 έως τον Αύγουστο του 1978. Τον Ιούνιο του 1977 προσλαμβάνονται οι John Waite και Γιώργος Ασπρομάλλης «δι' επιστημονικήν μεταπτυχιακήν δραστηριότητα». Η κύρια ερευνητική κατεύθυνση ήταν η μελέτη των διηγευμένων καταστάσεων ατόμων και μορίων, κατεύθυνση η οποία εξακολουθεί να καλλιεργείται μέχρι σήμερα στο Ινστιτούτο.

Οι καιροί ήταν μάλλον ηρωικοί. Ελλείψει υπολογιστή, οι υπολογισμοί γίνονται στα γραφεία της IBM Hellas και αργότερα, νύχτα, στον υπολογιστή του Ομίλου Μποδοσάκη στη λεωφόρο Αμαλίας. Οι υπολογιστικοί κώδικες γράφτηκαν απ' την αρχή. Η εισαγωγή των δεδομένων γινόταν με διάτρητες κάρτες που έπρεπε να μεταφερθούν δια μέσου του Εθνικού Κήπου. Η έξοδος των αποτελεσμάτων γινόταν μόνο μέσω εκτυπωτή. Ο όμιλος Μποδοσάκη διέθετε τον υπολογιστή IBM 360/125, σχετικά βραδύ για την εποχή του, αλλά με μεγάλη μνήμη. Ο Donald Beck θυμάται ότι χρονομετρώντας την εκτύπωση ήταν σε θέση να εντοπίσει τα χρονόμετρα βόρα μέρη του κώδικα. Οι διορθώσεις γίνονταν την επό-

μενη μέρα στον ατέλειωτο χρόνο που χρειαζόταν το λεωφορείο της γραμμής από το σπίτι του στην Άνω Βούλα μέχρι το Ίδρυμα. Μέχρι το τέλος της παραμονής του στην Ελλάδα, οι κώδικες –πολλοί από τους οποίους χρησιμοποιούνται μέχρι σήμερα– είχαν γίνει είκοσι φορές ταχύτεροι, ανεξαρτήτως υπολογιστικής μηχανής.

Το ΚΘΧ μπήκε δυναμικά στην επιστήμη με στόχο την παραγωγή πρωτότυπων θεωρητικών μεθόδων και αριθμητικών υπολογισμών ακριβείας, ικανών να συγκριθούν με υπάρχουσες πειραματικές μετρήσεις ή να προκαλέσουν νέα πειράματα. Η βασική ερευνητική κατεύθυνση αφορούσε τη μελέτη της δομής και της δυναμικής ατόμων, μορίων, συσσωματωμάτων, στερεών κ.λπ. με έμφαση στις διηγεμένες καταστάσεις. Η εγγενής δυσκολία του πεδίου έγκειται στην αδυναμία ακριβούς επίλυσης του προβλήματος των πολλών σωμάτων. Οι Νικολαΐδης και Beck εισήγαγαν τη «φιλοσοφία» της βέλτιστης περιγραφής κάθε κατάστασης, διηγεμένης ή μη, ξεχωριστά. Η προσέγγισή τους, που καθιερώθηκε ως «θεωρία της προκαθορισμένης κατάστασης» (state specific approach), προϋποθέτει την έξυπνη αρχική περιγραφή των καταστάσεων, αλλά απαιτεί σημαντικά μικρότερη υπολογιστική ισχύ, πράγμα που ήταν και το πιο σοβαρό πρόβλημα τότε. Έτσι έγινε δυνατή η αντιμετώπιση προβλημάτων που ήταν αδύνατον να επιλυθούν από πρώτες αρχές.

Επενδύοντας στο καλό ξεκίνημα του ΚΘΧ, προσλαμβάνονται οι διδάκτορες Γιάννης Κομνηνός (York), το 1977, και Ιωάννα Θεοδωρακοπούλου (Toronto), το 1978, για να εργαστούν ως επιστημονικοί συνεργάτες με διετή σύμβαση. Ο πρώτος ανέλαβε να αναπτύξει υπολογιστικά εργαλεία και εφαρμογές επίλυσης του συνεχούς φάσματος των ατόμων, και η δεύτερη ασχολήθηκε με την ανάπτυξη και την εφαρμογή μεθόδων υπολογισμού των διηγεμένων καταστάσεων μορίων.

Η επιστημονική αυθεντία του Κέντρου αναγνωρίζεται πολύ γρήγορα με την ανάθεση της διοργάνωσης, το 1978, ενός NATO Advanced Study Institute στην Κω, τα Πρακτικά του οποίου εκδόθηκαν υπό την επιμέλεια των Νικολαΐδη και Beck (*Excited States in Quantum Chemistry*, Reidel, 1978). Το συνέδριο της Κω έχει μείνει στη μνήμη αυτών που συμμετείχαν ως μια θαυμάσια και ευχάριστη ευκαιρία μάθησης. Ήταν το πρώτο συνέδριο στην Ελλάδα σε θέματα Θεωρητικής Χημείας με σπάνια ευρύτητα πεδίου (από τα άτομα, στα μόρια, στα στερεά) και με συμμετοχή πολλών διακεκριμένων επιστημόνων από όλο τον κόσμο.



Μία από τις πρώτες εργασίες του ΚΘΧ. Υπογράφεται από τους Νικολαΐδη και Beck και δημοσιεύθηκε στο International Journal of Quantum Chemistry, το 1978. Είναι η θεωρητική εργασία του Ινστιτούτου με τη μεγαλύτερη διεθνή απήχηση, έχοντας δεχτεί περισσότερες από 100 αναφορές μέχρι σήμερα.

## Κέντρο / Ινστιτούτο Θεωρητικής & Φυσικής Χημείας (1979-1997)

Από τον Ιανουάριο του 1979 η θέση του Διευθυντή του Κέντρου Φυσικοχημείας-Φασματοσκοπίας είναι κενή, ενώ τα διοικητικά του καθήκοντα αναλαμβάνει ο ίδιος ο Λ. Ζέρβας, ήδη 77 ετών. Η μεταβατική αυτή περίοδος λήγει στις 22 Ιουνίου του 1979, όταν, με εισήγηση του Διευθύνοντος Συμβούλου Αντώνη Κονταράτου, το ΔΣ του ΕΙΕ

αποφασίζει τη συγχώνευση του Κέντρου Φυσικοχημείας-Φασματοσκοπίας με το Κέντρο Θεωρητικής Χημείας. Δημιουργείται το Κέντρο (μετέπειτα Ινστιτούτο) Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας (ΚΘΦΧ), με Διευθυντή τον Κλ. Νικολαΐδη. Η συγχώνευση συνδυάζεται σχεδόν αμέσως με αλλαγή του οργανωτικού σχήματος των Κέντρων του Ιδρύματος, τα οποία διαρθρώνονται πλέον σε Προγράμματα, αντί των σχετικά αυτόνομων Τμημάτων. Οι υπεύθυνοι των Προγραμμάτων ασκούν επιστημονική εποπτεία σε ευρύ πεδίο, αλλά δεν έχουν ανεξάρτητους πόρους και διοικητικές αρμοδιότητες.

Η συγχώνευση των δύο Κέντρων στο ενιαίο ΚΘΦΧ άνοιξε την προοπτική συνεργιών μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών δεξιοτήτων, προσφέροντας ευκαιρίες σημαντικής ανάπτυξης για κάθε μία από τις ερευνητικές συνιστώσες του νέου Κέντρου. Ωστόσο, η αρχικά ετεροβαρής στελέχωση των δύο συνιστωσών (Προγραμμάτων), αλλά και η απόσταση μεταξύ των ερευνητικών τους ενδιαφερόντων, επέβαλαν στρατηγικά σχεδιασμένες κινήσεις και, βέβαια, προσπάθεια σύγκλισης απ' όλες τις πλευρές.

### Πρόγραμμα Α': Ανάπτυξη και εφαρμογές της κβαντικής θεωρίας

Η θεωρητική ομάδα διευρύνεται σημαντικά. Το 1979 προσλαμβάνεται ο Μάνθος Παπαδόπουλος (Bristol), ο οποίος, συνεργαζόμενος με τον John Waite, ασχολείται μεθοδικά με τον υπολογισμό της επαγόμενης πολωσιμότητας και υπερπολωσιμότητας σε μεγάλα οργανικά μόρια (αλκάνια, αλκένια και πολυένια, αρωματικές ενώσεις κ.λπ.). Τον ίδιο χρόνο έρχεται ο Αντώνης Ανδριώτης (Urbana-Champaign), εισάγοντας τον υπολογισμό των ιδιοτήτων μεταλλικών επιφανειών, και ο Θόδωρος Μερκούρης («Δημόκριτος») για να αναπτύξει τη μέθοδο μιγαδικών συντεταγμένων για τη μελέτη των καταστάσεων συντονισμού. Στην πορεία θα αναπτύξει μεθόδους για τη θεωρητική μελέτη της απόκρισης ατόμων και μικρών μορίων σε ισχυρά πεδία laser. Το 1980 προσλαμβάνεται ο Αριστοφάνης Μητρόπουλος (Catholic University) που ασχολείται με τη μελέτη μηχανισμών μεταφοράς ενέργειας κατά την κρούση ατόμων με διατομικά μόρια, και, στη συνέχεια, με τον υπολογισμό δυναμικών επιφανειών διηγεμένων καταστάσεων και σχετικών ιδιοτήτων τους σε ολιγοατομικά συστήματα. Λίγο αργότερα (1981), έρχεται ο Σταύρος Φαράντος (Sussex) που μελετά τη δυναμική τριατομικών συσσωματωμάτων και, στη συνέχεια, την εμφάνιση χαοτικής συμπεριφοράς σε δονητικές καταστάσεις πολυατομικών μορίων. Την ίδια χρονιά, προσλαμβάνεται ο Σταύρος Θάνος («Δημόκριτος») που ασχολείται με την κβαντική περιγραφή των μαγνητικών ιδιοτήτων της ύλης.

Η Ιωάννα Θεοδωρακοπούλου περνά μεγάλα χρονικά διαστήματα στα Πανεπιστήμια της Βόννης και του Wuppertal συνεργαζόμενη με τους καθηγητές S. Peyerimhoff και R. J. Buenker. Η συνεργασία οδηγεί στην ανάπτυξη νέας υπολογιστικής υποδομής, που είναι γνωστή με τα αρχικά MRDCI, και αποδεικνύεται εξαιρετικά ισχυρή για τη μελέτη μοριακών καταστάσεων. Ο Γιάννης Πετσαλάκης ξεκινά τη διδακτορική του διατριβή (Μελέτη διηγεμένων καταστάσεων μοριακών συστημάτων χρησιμοποιώντας μη ορθοκανονικούς ηλεκτρονιακούς σχηματισμούς, 1985), στα πλαίσια της οποίας αναπτύσσει λογισμικό για υπολογισμούς με μη ορθογώνιες βάσεις. Στη συνέχεια, οι Γ. Πετσαλάκης και Ι. Θεοδωρακοπούλου αναπτύσσουν δραστηριότητα στον τομέα των διεργασιών σε διηγεμένες καταστάσεις μικρών μορίων και ιδιαίτερα στα υδρίδια των ευγενών αερίων. Η δραστηριότητα αυτή έχει σημαντική απήχηση γιατί καθιστά δυνατή την ερμηνεία πειραμάτων φασμα-



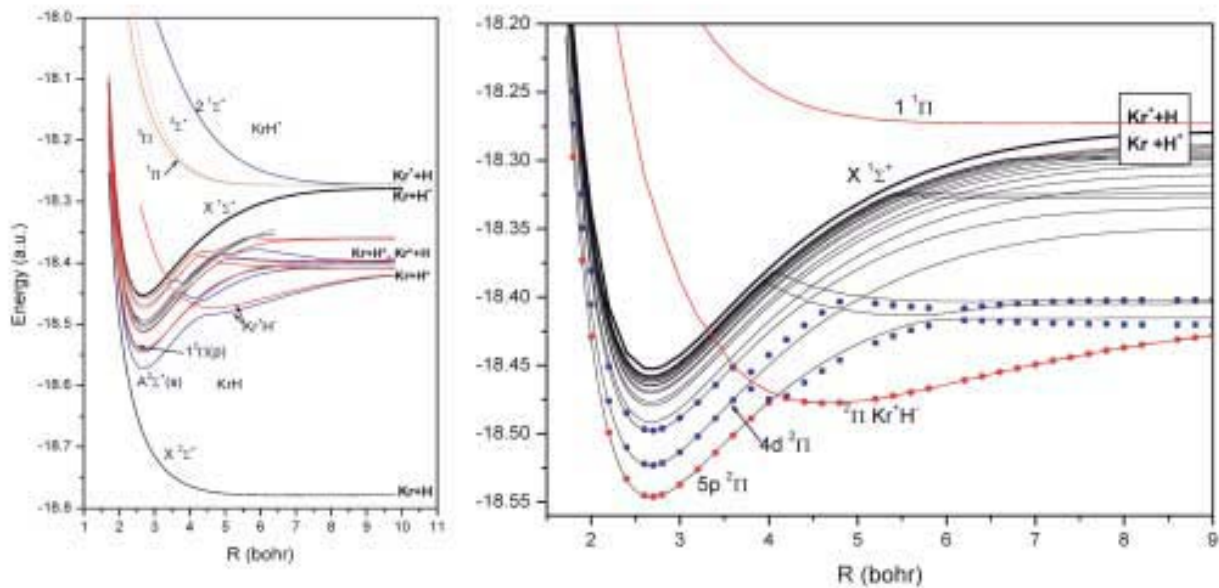
Το προσωπικό της ομάδας Φυσικοχημείας (Πρόγραμμα Β') σε φωτογραφία του 1979, αμέσως μετά τη συγχώνευση των δύο Κέντρων στο ενιαίο Κέντρο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας (ΚΘΦΧ). Από αριστερά, διακρίνονται οι ερευνητές Βάννα Πανδή, Γιώργος Μακρυγιάννης και Γιώργος Κ. Παπαβασιλείου, ο μεταπτυχιακός υπότροφος Daranidar Layek και οι παρασκευαστές Έφη Κονταράκη και Πασχάλης Μποδόκος.

τοσκοπίας που εκτελούνται σε μεγάλα ερευνητικά κέντρα (MPI-Garching, SRI-Stanford, NRC-Canada κ.α.).

Επιτέλους, το 1981 αγοράζεται και εγκαθίσταται στο ΕΙΕ ο super mini computer Perkin Elmer 3242-3220. Θα κοστίσει περισσότερα από 265.000 δολάρια, και θα δώσει, για πρώτη φορά, στο Κέντρο την πολυπόθητη υπολογιστική του αυτονομία. Το 1983, ο Γιώργος Ασπρομάλλης ολοκληρώνει τη διδακτορική του διατριβή (Ηλεκτρονιακή συσχέτιση και σχετικιστικές επιδράσεις στις ιδιότητες των ατόμων). Ακολουθούν ο John Waite (Κβαντομηχανικοί υπολογισμοί των ηλεκτρικών πολωσιμότητων και υπερπολωσιμότητων μερικών οργανικών μορίων και ανιόντων, 1984) και ο Γ. Πετσαλάκης.

Η σύνθεση της θεωρητικής ομάδας μεταβάλλεται σταδιακά με τις αποχωρήσεις των Μ. Παπαδόπουλου, J. Waite και Σ. Φαράντου (1984) και αργότερα του Α. Ανδριώτη (1989) και του Σ. Θάνου (1992), ενώ, παράλληλα, προσλαμβάνονται νέοι ερευνητές για ενίσχυση

του Προγράμματος. Το 1987 προσλαμβάνεται ο Μάκης Μπακάλης (Urbana-Champaign) με ειδικότητα στον προσδιορισμό της ηλεκτρονικής δομής των στερεών. Από το 1987 ο Πέτρος Βαλταζάνος (Iowa) και από το 1988 ο Μάνος Σημαντήρας (Cambridge) θα ασχοληθούν με τη μελέτη μετασταθών καταστάσεων υδριδίων ελαφρών μετάλλων για αποθήκευση ενέργειας. Τρεις από τους μεταδιδακτορικούς συνεργάτες του Ινστιτούτου θα προσληφθούν ως ερευνητές, ο Γιώργος Ασπρομάλλης, το 1984, ο Γιάννης Πετσαλάκης, το 1986 και ο Θόδωρος Μερκούρης, το 1988. Ο Μιχάλης Χρυσός εκπονεί τη διδακτορική του διατριβή (Μελέτη απλά, διπλά και τριπλά διηγεμένων καταστάσεων συντονισμού σε ατομικά και μοριακά συστήματα με χρήση ημικλασσικών και κβαντικών μεθόδων) που θα ολοκληρωθεί το 1990. Τέλος, ο Νίκος Θεοδωρακόπουλος (Konstanz) έρχεται το 1989 και εισάγει νέα δραστηριότητα στατιστικής φυσικής με επίκεντρο τις ιδιότητες των μη γραμμικών κυμάτων -



Στο ΙΘΦΧ αναπτύσσονται εξειδικευμένα υπολογιστικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται για τον ακριβή και λεπτομερή χαρακτηρισμό των ενεργειακών καταστάσεων και των ιδιοτήτων ατόμων και μορίων. Στο αριστερό μέρος της εικόνας φαίνονται οι δυναμικές καμπύλες του συστήματος Kr-H, όπως υπολογίζονται από πρώτες αρχές. Τα αποτελέσματα του υπολογισμού τροφοδοτούνται σε πολυκαναλικούς υπολογισμούς (MQDT) για να προβλέψουν τις υψηλά διηγεμένες καταστάσεις και τον αυτοϊονισμό τους (δεξιά). Η συνολική περιγραφή του συστήματος είναι απαραίτητη για τον σχεδιασμό νέων laser τύπου excimer, καθώς και για την κατανόηση των ιδιοτήτων του πλάσματος.



σολιτονίων στη συμπεκνωμένη ύλη. Θα ασχοληθεί, κατ' αρχήν, με θεμελιώδη προβλήματα μη γραμμικής φυσικής (ημικλασικό χάος, φαινόμενα μεταφοράς σε σχεδόν ολοκληρώσιμα συστήματα), καθώς και –σε συνεργασία με τον Μ. Μπακάλη– με εφαρμογές σε μαγνητικά συστήματα. Στη δραστηριότητα αυτή εντάσσεται και το διδακτορικό του Βασίλη Κωνσταντούδη (*Μη γραμμική δυναμική μαγνητικών συστημάτων*, 1998).

Κατά τη διάρκεια του 1987 αποσύρεται ο υπολογιστής Perkin Elmer και αντικαθίσταται από δύο υπερυπολογιστές «τσέπης» της εποχής (γύρω στο 1 κυβικό μέτρο ο καθένας): τους δύο FPS M64/30 attached processors. Η ιδιομορφία τους ήταν ότι ο χρήστης δεν επικοινωνούσε απευθείας με αυτούς, μια και το λειτουργικό τους σύστημα ήταν πρωτόγονο, αλλά έστελνε υπολογισμούς προς εκτέλεση μέσω δύο συνδεδεμένων micronax. Τα κλειστά αυτά κουτιά «άγριας» υπολογιστικής δύναμης αντιστοιχούσαν περίπου στο ένα χιλιοστό της ταχύτητας ενός καλού σημερινού προσωπικού υπολογιστή, άνοιξαν όμως πολλές νέες δυνατότητες. Ο πρώτος πραγματικός υπερυπολογιστής αποκτάται από

το ΙΘΦΧ το 1990, με αρχική χρηματοδότηση μέσω ενός προγράμματος επιμόρφωσης νέων επιστημόνων του Υπουργείου Εργασίας. Είναι ο FPS 500, ανυσματικός επεξεργαστής μεγέθους ενός μικρού δωματίου, πραγματικά πολυχρηστικός με λειτουργικό σύστημα Unix και σημαντικό αριθμό δίσκων. Η ταχύτητά του σε καλά ανυσματοποιημένα προγράμματα ήταν εφάμιλλη του σημαντικά ακριβότερου IBM 3090 που αποτελούσε το σημείο αναφοράς της εποχής. Ο FPS 500 (ο οποίος στο τέλος μετονομάστηκε σε Cray Superserver λόγω εξαγοράς της κατασκευάστριάς) υπηρέτησε το Ινστιτούτο πολύ καλά για μια πενταετία. Εκεί έτρεξαν υπολογισμοί καλής ποιότητας –ακόμα και με τα σημερινά δεδομένα– σε μόρια με μέχρι έξι ή οκτώ άτομα. Η επόμενη επέκταση της υπολογιστικής υποδομής θα γίνει το 1992. Αγοράζονται οι δύο DEC AXP 3000/500S, με δυο από τους πρώτους επεξεργαστές τεχνολογίας alpha που ήρθαν στην Ελλάδα. Μια περίπου δεκαετία μετά τον ιστορικό Cray 1S, οι υπολογιστές αυτοί συμπύκνωναν περισσότερη δύναμη σε ένα κουτί που έμπαινε απλά στην πρίζα και χωρούσε κάτω από ένα γραφείο. Ταυτόχρονα, η σύνδεση του ΕΙΕ με το τότε ακαδημαϊκό δίκτυο «Αριάδνη» έδινε τη δυνατότητα ηλεκτρονικής επικοινωνίας με τη διεθνή επιστημονική κοινότητα.

### Πρόγραμμα Β': Ανάπτυξη και φασματοσκοπία υλικών

Για το δεύτερο Πρόγραμμα του ΚΘΦΧ, η περίοδος 1979-1984 ταυτίζεται με τη δουλειά του Γιώργου Παπαβασιλείου που εργάζεται σχεδόν μόνος και δημοσιεύει περισσότερες από 20 εργασίες σε διεθνή περιοδικά. Μεγάλο μέρος της προσπάθειάς του αφορά τη σύνθεση μεταλλο-οργανικών συμπλόκων και τον χαρακτηρισμό τους ως προς τις οπτικές και ηλεκτρικές τους ιδιότητες. Ιδιαίτερα αξιοσημείωτη είναι η πρωτιά στη μελέτη του φθορισμού και του φάσματος Raman σωματιδίων θείου και καδμίου με νανοσκοπικές διαστάσεις, δηλαδή με φυσικό μέγεθος συγκρίσιμο του εξιτονικού (1981). Στην ίδια περίοδο ανήκει ένα εκτενές άρθρο ανασκόπησης για τις οπτικές ιδιότητες μικρών ανόργανων και οργανικών μεταλλικών σωματιδίων, το οποίο εξακολουθεί να έχει μεγάλη απήχηση παρά την αλματώδη εξέλιξη του πεδίου.

Η στελέχωση και θεματολογία του Β' Προγράμματος θα διευρυνθούν με τον ερχομό του Ευστράτιου Καμίτσου (Brown) στις αρχές του 1984, ο οποίος εισάγει δύο νέες ερευνητικές κατευθύνσεις. Αυτές εστιάζονται στην

● 156



Δύο φωτόμετρα κενού που καλύπτουν την περιοχή του μέσου και άπω υπερούθρου στο ΙΘΦΧ. Σε πρώτο πλάνο, το φωτόμετρο 11.3ν της Bruker, που αγοράστηκε το 1985 και, σε συνδυασμό με τα φωτόμετρα Raman, χρησιμοποιείται στη μελέτη υλικών. Σε δεύτερο πλάνο αριστερά, το νέο φωτόμετρο (Bruker, Vertex 80ν), που αποκτήθηκε το 2007.



Η πρώτη σελίδα της δημοσίευσης του ΙΘΦΧ που εισάγει την τεχνική της κατοπτρικής ανακλαστικότητας στη μέτρηση και ποσοτική αποτίμηση φασμάτων βορικών υάλων λιθίου στο υπέρυθρο. Δημοσιεύθηκε το 1990 από τους Καμίτσο, Πάτση, Καρακασίδη και Χρυσικό στο Journal of Non-Crystalline Solids. Είναι η πειραματική δημοσίευση του Ινστιτούτου με τη μεγαλύτερη διεθνή επιστημονική απήχηση, συγκεντρώνοντας περισσότερες από 170 αναφορές μέχρι σήμερα.

ανάπτυξη και μελέτη άμορφων υλικών (υάλων) που εμφανίζουν υψηλή ιοντική αγωγιμότητα, καθώς και ημιαγωγικών μεταλλο-οργανικών υλικών υπό μορφή λεπτών υμενίων για τεχνολογικές εφαρμογές. Οι καινούργιες δραστηριότητες απαιτούν νέο ερευνητικό εξοπλισμό. Στο πλαίσιο του πενταετούς προγράμματος του Ινστιτούτου, εγκαθίστανται κλίβανος υψηλών θερμοκρασιών για την παρασκευή των υάλων και κατάλληλο σύστημα υψηλού κενού για τα λεπτά υμένια, ενώ από

το 1985 έχει αγοραστεί ένα νέο φωτόμετρο μέσου και άπω υπέρυθρου με μετασχηματισμό Fourier (Bruker 113v), το πρώτο του είδους στην Ελλάδα. Το νέο φωτόμετρο λειτουργεί υπό κενό και διαθέτει έναν έξυπνο μηχανισμό αυτοματοποιημένης εναλλαγής διαχωριστών δέσμης, που επιτρέπει τη συνεχή συλλογή του φάσματος υπέρυθρου σε ευρύτατη περιοχή συχνοτήτων. Το φωτόμετρο αυτό θα συμπληρώσει, ουσιαστικά, τις δυνατότητες του υπάρχοντος φωτομέτρου Raman. Ο συνδυασμός των δύο τεχνικών δονητικής φασματοσκοπίας θα αποβεί καθοριστικός για τη λεπτομερή μελέτη στο Ινστιτούτο κρυσταλλικών και άμορφων υλικών, τα οποία μπορεί να είναι οργανικά, ανόργανα, αλλά και βιολογικής προέλευσης. Η τελευταία δυνατότητα θέτει και τις βάσεις μιας μακροχρόνιας συνεργασίας με το Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Αθηνών, που αφορά τη φασματοσκοπική διάγνωση της δευτεροταγούς δομής των πρωτεϊνών. Η δραστηριότητα αυτή έχει σήμερα επεκταθεί και συνεχίζεται με επιτυχία.

Ο πρώτος μεταπτυχιακός φοιτητής που εκπονεί τη διδακτορική του διατριβή υπό την επίβλεψη του Ε. Καμίτσου είναι ο Μιχάλης Καρακασίδης (Φασματοσκοπικές μελέτες Raman και υπέρυθρου βορικών γαλιών αλκαλίων, 1990). Η περιοχή αυτή θα ενισχυθεί, το 1988, με τον Γιώργο Χρυσικό (Brown) και θα αποτελέσει κεντρική ερευνητική δράση του Ινστιτούτου με σημαντική απήχηση μέχρι σήμερα, συμβάλλοντας στη διεθνή προσπάθεια για την ανάπτυξη στερεών ηλεκτρολυτών. Το ζητούμενο είναι η δομική διάγνωση του υλικού σε τοπικό και ενδιάμεσο επίπεδο (η δομική περιοδικότητα ευρείας έκτασης απουσιάζει) και η κατανόηση του μηχανισμού με τον οποίο η δομή επηρεάζει την κινητικότητα των κατιόντων. Προς την κατεύθυνση αυτή γίνονται στις αρχές του '90 δύο συμπληρωματικές ερευνητικές κινήσεις. Εισάγεται η φασματοσκοπία ηλεκτρικής εμπέδησης, η οποία, σε συνδυασμό με τη φασματοσκοπία υπέρυθρου, επεκτείνει τη φασματική κάλυψη σε περίπου 14 τάξεις μεγέθους στην κλίμακα των συχνοτήτων. Καθίσταται έτσι δυνατή η πειραματική μελέτη της δυναμικής των φορέων φορτίου (κατιόντων) και της εξάρτησής της από την τοπική δομή του υαλώδους πλέγματος. Παράλληλα, εισάγεται η τεχνική της κατοπτρικής ανακλαστικότητας στη μέτρηση και ποσοτική αποτίμηση των φασμάτων υάλων στο υπέρυθρο, γεγονός που επιτρέπει τη σωστή και λεπτομερή ανάλυση των δομικών χαρακτηριστικών τέτοιων υλικών. Τρεις επιπλέον διδακτορικές διατριβές αφορούν τις προσπάθειες αυτής της περιό-



● 158

Ερευνητές, υπότροφοι, διοικητικό και τεχνικό προσωπικό του ΙΦΧ σε οικογενειακή φωτογραφία από τα τέλη του 1993. Καθιστοί, από αριστερά, οι Ιωάννα Θεοδωρακοπούλου, Ειρήνη Αρώνη, Γιώργος Παπαβασιλείου, Πόπη Σεριάτου, Έφη Κονταράκη, Κλεάνθης Νικολαΐδης, Γιάννης Κομνηνός και Κώστας Κεφαλάς. Πίσω τους, όρθιοι, οι Ευδοκία Πατσιλινάκου, Κώστας Λούκος, Λίτσα Σαραντοπούλου, Γιάννης Πετσαλάκης, Μιχάλης Κομπίτσας, Γιάγκος Γιαννόπουλος, Μάκης Μπακάλης, Μανώλης Θραψανιώτης, Βασίλης Γκιώνης, Μάνος Σημαντήρας, Θόδωρος Μερκούρης, Γιώργος Χρυσικός, Σπύρος Σπύρου, Πέτρος Βαλταζάνος, Στράτος Καμίτσος και Αριστοφάνης Μητρόπουλος. Στην τελευταία σειρά, οι Mirek Bylicki, Σπύρος Θέμελης, Κώστας Λιάγκος, Νίκος Πιάγκος, Ζωή Κόλλια, Χρίστος Συνάνης, Δημήτρης Λαγουβάρδος και Γιάννης Καπουτσής.

δου: των Γιάννη Καπουτσή (Σύνθεση και φασματοσκοπική μελέτη άμορφων υλικών με τεχνολογική σημασία, 1998) Ανδρέα Πάτση (Σύνθεση και φασματοσκοπική μελέτη υάλων με τεχνολογική σημασία. Συσχέτιση δομής και ιδιοτήτων βορικών υάλων, 1999) και Γιάγκου Γιαννόπουλου (Δομή και ιδιότητες γερμανικών υάλων αλκαλίων, 2000).

Η σύνθεση νέων αγώγιμων οργανικών αλάτων και ο χαρακτηρισμός των ιδιοτήτων τους εξακολουθεί να αποτελεί μία από τις κεντρικές δραστηριότητες του Β' Προγράμματος, η οποία έχει ενισχυθεί από το 1986 με την πρόσληψη ενός ακόμα ερευνητή, του Βασίλη Γκιώνη (College de France) που έχει εξειδικευθεί στην αυτοοργάνωση της μαλακής ύλης, τους υγρούς κρυστάλλους και τα υμένια Langmuir-Blodget. Μια σειρά διδακτορι-

κών διατριβών, υπό την επίβλεψη του Γ. Κ. Παπαβασιλείου, αποτυπώνει την ερευνητική θεματολογία της εποχής: Γιάννης Ζαμπούνης, Αγωγή Γλυκά με πολυθειούχους π-δότες και π-δέκτες (1987), Στέλιος Γιαννόπουλος, Αζωτούχα παράγωγα του τετραθειοαφυοβλαλενίου και τετρασεληναφυοβλαλενίου και αγωγή αλάτα αυτών (1987), Γιώργος Μούσδης, Σύνθεση και μελέτη μονοδιάστατων και διδιάστατων αγώγιμων οργανικών υλικών (1990), Βενετσιάνα Κακούση, Συμμετρικά και ασύμμετρα τετραεταφυοβλαλένια και αγωγή αλάτα αυτών - Σύνθεση και Μελέτη (1992), Δημήτρης Λαγουβάρδος, Οργανικά ανόργανα υλικά που βασίζονται σε ετεροκυκλικές ενώσεις με οξυγόνο, θείο, σελήνιο και άζωτο (1994) και Γιάννης Κούτσελας, Μη συμβατικά χαμηλοδιάστατα ημιαγώγια συστήματα (1998).

Η διεθνής απήχηση της εργασίας των ερευνητών του Β' Προγράμματος του ΙΘΦΧ μεγαλώνει σημαντικά. Ο Γ. Κ. Παπαβασιλείου συνδιοργανώνει στις Σπέτσες, το 1989, ένα NATO ASI με θέμα τα Χαμηλοδιάστατα Συστήματα και τη Μοριακή Ηλεκτρονική. Δύο από τους συμμετέχοντες στο συνέδριο, οι Alan Heeger και Alan MacDiarmid, θα τιμηθούν με το Βραβείο Nobel Χημείας το 2000. Λίγο αργότερα, ο Ε. Καμίτσος και ο Γ. Χρυσικός συνδιοργανώνουν στην Αθήνα, το 1993, Διεθνές Συνέδριο στην Επιστήμη και Τεχνολογία της Υάλου με ευρεία διεθνή συμμετοχή. Σημαντικοί επιστήμονες από την Ευρώπη, τις ΗΠΑ και την Ιαπωνία επισκέπτονται το Ινστιτούτο, κάποιιοι με σαββατική άδεια, και οικοδομούνται νέες διεθνείς συνεργασίες.

### Πρόγραμμα Γ': Φασματοσκοπία ατόμων και μορίων με lasers

Παρακολουθώντας τις τεχνολογικές εξελίξεις της εποχής, ο Κλ. Νικολαΐδης έχει εισαγάγει από τα τέλη του 1983 ένα τρίτο ερευνητικό Πρόγραμμα που αφορά στα Laser και τις εφαρμογές τους στη Φυσιχοημεία. Για τις ανάγκες του νέου Προγράμματος προσλαμβάνονται οι διδάκτορες φυσικοί Μιχάλης Κομπίτσας (Heidelberg), το 1983, και Αλκιβιάδης-Κωνσταντίνος Κεφαλάς (Manchester), το 1984. Ένα χρόνο αργότερα έρχεται ο αείμνηστος Σπύρος Σπύρου (Oak Ridge National Lab) με ειδικευση στο πεδίο των αρνητικών ιόντων και ιδιαίτερα στις διαδικασίες προσκόλλησης ηλεκτρονίων σε πολυατομικά μόρια. Ξεκινά αμέσως η αγορά του απαιτούμενου βασικού εξοπλισμού, όπως lasers, φασματογράφοι, ανιχνευτές, συστήματα κενού, που συμπληρώνεται με εξειδικευμένες ιδιοκατασκευές (ατομική δέσμη, φασματομέτρο μάζας του χρόνου πτήσης κ.λπ.). Ο ηλεκτρονικός Σταύρος Χαλκιαδάκης και ο μηχανουργός Κώστας Λούκος έχουν μόλις προσληφθεί, ενώ αργότερα προσλαμβάνεται και ο ηλεκτρονικός Κώστας Νομίδης.

Ο Α.-Κ. Κεφαλάς ολοκληρώνει τον σχεδιασμό και την ιδιοκατασκευή του πρώτου laser φθορίου γρήγορης εκκένωσης στη χώρα, νωρίτερα από ένα αντίστοιχο σύστημα που κατασκευάζεται, ανεξάρτητα, στο Oxford University την ίδια χρονική περίοδο. Το laser που εκπέμπει στο βαθύ υπεριώδες (157 nm) με παλμούς διάρκειας 15-20 ns, ( $1 \text{ ns} = 10^{-9} \text{ s}$ ), θα αξιοποιηθεί αμέσως στη μελέτη της φωτοχημείας μεταλλικών συσσωματωμάτων. Το 1986 το ίδιο laser χρησιμοποιείται για να αντλήσει ένα laser χρωστικής με κατανεμημένη ανατροφοδότηση. Το σύστημα αποδίδει παλμούς διάρκειας 80 ps ( $1 \text{ ps} = 10^{-12} \text{ s}$ ). Έτσι, το 1987 το Ινστιτούτο μελετά και δημοσι-

εύει για πρώτη φορά τις μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες ατμών νατρίου σε κλίμακα picosecond. Στην περίοδο αυτή αντιστοιχούν οι διδακτορικές διατριβές του Τάσου Μικρόπουλου (*Μη γραμμική συζυγία οπτικής φάσης με μίξη τεσσάρων κυμάτων ίδιας συχνότητας με χρήση παλμών ps σε ατμούς νατρίου και καλίου*, 1990), και του Κώστα Σκορδούλη (*Ανάπτυξη laser μοριακού φθορίου και φωτοδιάσπαση του HgBr<sub>2</sub> στα 157 nm*, 1991).

Το πρώτο παλμικό laser φθορίου παραμένει σε λειτουργία μέχρι το 1990. Θα το διαδεχθεί ένα πλήρως ανασχεδιασμένο διπλό σύστημα ενισχυτή-ταλαντωτή με βελτιωμένα χαρακτηριστικά δέσμης, που ολοκληρώθηκε το 1991 και βρίσκεται σε πλήρη λειτουργία μέχρι σήμερα. Ανάλογα με το αέριο που χρησιμοποιείται, το laser αποδίδει γραμμές στα 157, 193, 248, 305 και 357 nm. Την ίδια περίοδο κατασκευάζεται ένα πλήρες φωτόμετρο απορρόφησης με πηγή συνεχούς φάσματος που καλύπτει από το βαθύ υπεριώδες μέχρι το ορατό. Οι δύο μονάδες, κατάλληλα συνδυασμένες και με τη βοή-

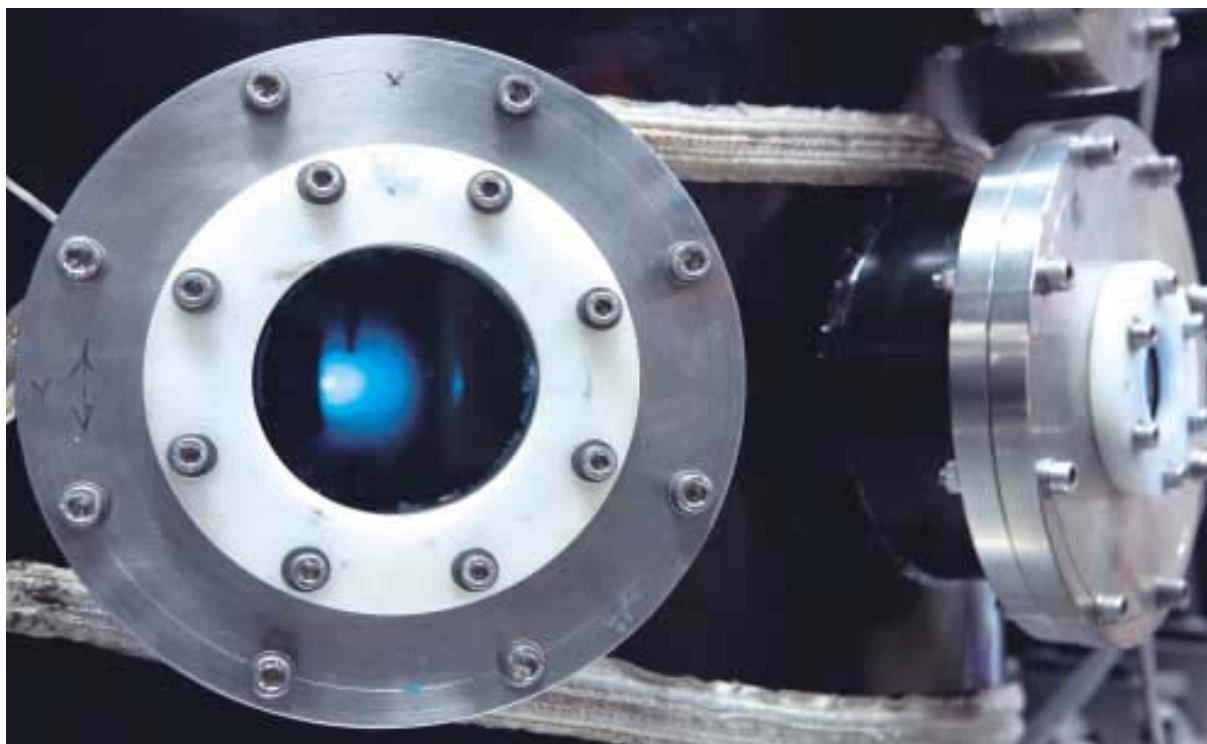


Διάταξη μικρομηχανικής επεξεργασίας υλικών με δέσμη laser στο Εργαστήριο Φωτονικής και Νανοεφαρμογών του ΙΘΦΧ. Σε πρώτο πλάνο, διακρίνεται το εμπορικό laser μοριακού φθορίου που εκπέμπει στα 157 nm. Σε δεύτερο πλάνο, φαίνεται ιδιοκατασκευασμένο laser που αποδίδει περισσότερες γραμμές στο υπεριώδες, ανάλογα με το αέριο που διεγείρεται. Στη θέση της μικρομηχανικής διάταξης μπορεί να τοποθετηθεί σύστημα για την παλμική εναπόθεση υλικών με τις ίδιες δέσμες laser.

θεια ενός τρίτου συστήματος φασματοσκοπίας μάζας, συνεχίζουν να επιτρέπουν τη φωτοχημική αποδόμηση της ύλης με φωτεινούς παλμούς ελεγχόμενης ενέργειας, την τροποποίηση νέων υλικών και την κατανόηση των μοριακών μηχανισμών θραύσης με φως.

Λίγο αργότερα, η έρευνα του Α.-Κ. Κεφαλά προσανατολίζεται στη διερεύνηση των ηλεκτρονιακών καταστάσεων τρισθενών ιόντων των σπανίων γαιών εντός κρυσταλλικού πλέγματος διαφόρων φθοριωμένων διηλεκτρικών κρυστάλλων. Την ίδια περίοδο σχεδιάζεται και κατασκευάζεται, σε συνεργασία με το Πανεπιστήμιο του Kazan, συσκευή ανάπτυξης κρυστάλλων με τη μέθοδο Bridgman-Stockbarger. Οι μέθοδοι του επαγομένου φθο-

ρισμού με laser στα 157 nm και της φασματοσκοπίας απορρόφησης στην περιοχή του υπεριώδους κενού εφαρμόζονται για πρώτη φορά, αποτελώντας εναλλακτική μέθοδο της χρήσεως εγκαταστάσεων ακτινοβολίας synchrotron. Ταυτόχρονα, η ερευνητική δραστηριότητα ενισχύεται από έργα χρηματοδοτούμενα από το 4ο Π.Π. της Ευρωπαϊκής Ένωσης και αναπτύσσεται επιστημονική συνεργασία με το Πανεπιστήμιο της Οξφόρδης. Παράλληλα, ανοίγονται νέοι ερευνητικοί ορίζοντες με την εφαρμογή αντίστοιχων μεθόδων στον χώρο της βιολογίας, των οργανικών υλικών και της λιθογραφίας, που θα συνεχιστούν μέχρι σήμερα. Από τη δραστηριότητα αυτή θα προκύψει ο κύριος κορμός των διδακτορικών της Ευαγγελίας Σαραντοπούλου (Φασματοσκοπία VUV



Θάλαμος υψηλού κενού στο Εργαστήριο Τεχνικών & Εφαρμογών Laser του ΙΘΦΧ. Η κυανή ανταύγεια στο εσωτερικό του θαλάμου οφείλεται στο πλάσμα που παράγεται από excimer laser 248 nm, το οποίο αποδομεί φύλλο νικελίου σε ατμόσφαιρα οξυγόνου. Η τεχνική επιτρέπει την ελεγχόμενη εναπόθεση λεπτών υμενίων οξειδίου σε διάφορα υποστρώματα, παράγοντας ενεργά στοιχεία που χρησιμοποιούνται σε οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές, φωτοβολταϊκά και αισθητήρες.

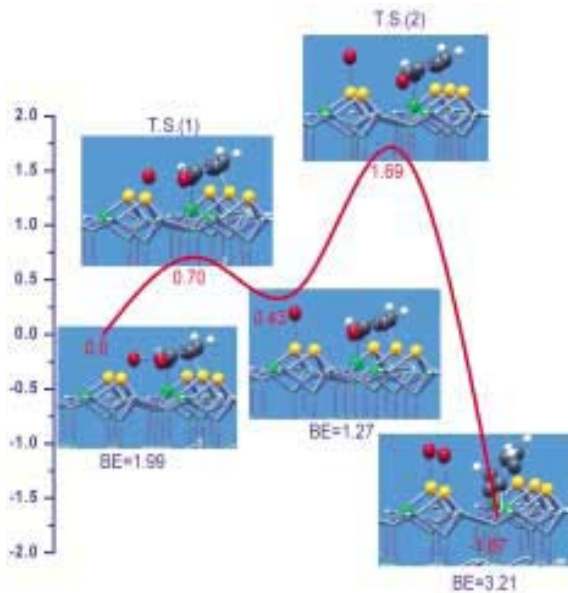


Πανοραμική άποψη του στείου χώρου του Εργαστηρίου Φωτονικής και Νανοεφαρμογών του ΙΘΦΧ. Στο κέντρο και δεξιά διακρίνεται ο σταθμός εργασίας ελέγχου φωτονικών αισθητήρων.

με λέιζερ μοριακού φθορίου: α) διηλεκτρικών κρυστάλλων με προσμίξεις σπανίων γαιών, β) μικρών συσσωματωμάτων του υδραργύρου, 1996) και, αργότερα, της Ζωής Κόλλια (Οπτικές ιδιότητες των  $4f^{-1}5d$  ηλεκτρονιακών διατάξεων των τρισθενών ιόντων των σπανίων γαιών σε ιοντικούς κρυστάλλους ευρέως ενεργειακού χάσματος, 2004).

Στο πεδίο των laser και των εφαρμογών τους, ο Μ. Κομπίτσας σχεδίασε και ανέπτυξε την πρώτη ατομική δέσμη μετάλλων στη χώρα, με χρήση παλμικού φασματογράφου μάζας τύπου χρόνου πτήσης (TOF). Η πρώτη δημοσίευση (1989) αφορούσε στη μελέτη ατόμων σε ισχυρά πεδία laser (nsec), έχοντας παρατηρήσει τον διπλό ιονισμό του στροντίου με απορρόφηση οκτώ φωτονίων από έναν μόνο παλμό laser. Με συντονιστική

διέγερση και χρησιμοποιώντας φωτόνια από δύο laser χρωστικής, μελετήθηκε η αλληλεπίδραση δύο ηλεκτρονίων με καταγραφή φασμάτων αυτοϊονισμού του στροντίου. Τα αποτελέσματα αυτά αποδείχθηκαν σημαντικά σε σχέση με την πολυκαναλική θεωρία κβαντικής ατέλειας (MQDT), μιας από τις σημαντικότερες υπολογιστικές τεχνικές της περιόδου αυτής για την κατανόηση της δομής των ατόμων. Το 1990 κατασκευάστηκε τρίτο laser χρωστικής, θερμοιονική δίοδος, καθώς και συνδυασμός κλιβάνου εξαέρωσης μετάλλων και οπτο-ηλεκτρονικού ανιχνευτή. Ο εξοπλισμός αυτός συνδυάστηκε με ταυτόχρονη χρήση πέντε lasers (δύο laser διέγερσης και τρία laser χρωστικής –το μοναδικό σύστημα στη χώρα μέχρι και σήμερα) για την επιτυχή καταγραφή των δέσμιων ενεργειακών καταστάσεων των ατόμων καδμίου και ψευδαργύρου μέχρι το κατώφλι ιονισμού σε



● 162

Η προσρόφηση μορίων σε επιφάνειες και η συνακόλουθη διάσπαση και αυτοοργάνωση των θραυσμάτων τους, παράγει, υπό προϋποθέσεις, επαναλαμβανόμενα σχήματα (δακτυλίους ή γραμμές) σε ατομική κλίμακα. Η σχετικά απλή αυτή τεχνική «μοριακής εκτύπωσης» επιφανειών εφαρμόζεται στην νανοηλεκτρονική. Στο ΙΘΦΧ χρησιμοποιούνται ημιεμπειρικές μεθοδολογίες κβαντικής χημείας για τη μελέτη των αντιδράσεων μορίων πάνω σε επιφάνεια. Στην εικόνα φαίνονται οι γεωμετρικές δομές διβρωμοβενζολίου, όπως αυτό αλληλεπιδρά με την επιφάνεια Si(111) και διασπάται για να αποδώσει δύο άτομα βρωμίου (με κόκκινο χρώμα) που προσδένονται ομοιοπολικά σε γειτονικά άτομα Si.

περιβάλλον ηλίου (He). Η δραστηριότητα αυτή, επιτρέποντας την επιλεκτική και με μεγάλη ευαισθησία αντίχτυση καδμίου και ψευδαργύρου, συντέλεσε στην ανάπτυξη τεχνικών διέγερσης RIS (Resonance Ionization Spectroscopy), σχετικών με τη μελέτη ρύπανσης του περιβάλλοντος από τοξικά βαρέα μέταλλα. Το εργαστήριο συνεργάστηκε με τον Τομέα Ατομικής και Μοριακής Φυσικής (Τμήμα Φυσικής) του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, καθώς και με το Ινστιτούτο Aimé-Cotton του Orsay. Στο προσωπικό του εντάχθηκε (1989-1994) η Ευδοκία Πατσιλινάκου (ΙΤΕ, Κρήτη) και για μια διετία (1990-1992) ο Z. Pan, επισκέπτης ερευνητής από την

Κίνα. Σε αυτή την περίοδο αναφέρονται οι διδακτορικές διατριβές των Σαμ Κοέν (Πολυφωτονική φασματοσκοπία του Sr - Αυτοϊονιζόμενες καταστάσεις με  $J=3$  και διπλός ιονισμός, 1990) και Σωτήρη Γκούτη (Φασματοσκοπική Μελέτη των διαταραχών των άρτιας ομοτιμίας αυτοϊονιζόμενων καταστάσεων του στρόντιου με διάταξη  $4dnl$  ( $l=s, d, g$ ) και στροφορμή  $J=0, 1, 2$ , με δύο πολωμένες ακτινοβολίες laser, 1991), και αργότερα του Κώστα Μπαχάρη (Φασματοσκοπία Laser των καταστάσεων Rydberg του καδμίου και του ψευδαργύρου σε θερμοιονική δίοδο, 2004).

## Θεσμικό πλαίσιο και χρηματοδότηση της έρευνας

Η δεκαετία του '80 χαρακτηρίζεται από ενδιαφέρουσες εξελίξεις στο ερευνητικό τοπίο της χώρας, που επηρέασαν βαθιά την πορεία και του ΚΘΦΧ. Από το 1982 έχει ιδρυθεί Υπουργείο Έρευνας και Τεχνολογίας, υπό τον Γεώργιο Λιάνη, και προετοιμάζει το ενιαίο θεσμικό πλαίσιο λειτουργίας των Ερευνητικών Κέντρων της χώρας. Το 1985 ψηφίζεται ο νόμος πλαίσιο για την έρευνα (Ν.1514), ο οποίος, μεταξύ άλλων, προβλέπει προκήρυξη της θέσης και θητεία για τον Διευθυντή Ινστιτούτου, καθώς και κρίσεις για την επιλογή και εξέλιξη των ερευνητών. Ένα χρόνο πριν την ψήφιση του νόμου, η Διοίκηση του ΕΙΕ προχωρεί σε κρίσεις για την ένταξη του υπάρχοντος ερευνητικού προσωπικού των Κέντρων σε βαθμίδες και την αξιολόγηση των Διευθυντών τους. Οι επόμενες κρίσεις ερευνητών δεν θα γίνουν πριν το 1990, αφού πρώτα δημοσιευθεί με μεγάλη καθυστέρηση το Προεδρικό Διάταγμα με τον «Οργανισμό» του ΕΙΕ (1989).

Τον Απρίλιο του 1995 διενεργούνται οι πρώτες αξιολογήσεις των Ινστιτούτων από εξωτερικές επιτροπές ορισμένες από τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ). Στην επιτροπή αξιολόγησης του ΙΘΦΧ προεδρεύει ο αείμνηστος καθηγητής του ΕΜΠ Ευάγγελος Αναστασάκης. Παρά το ατελές μεθοδολογικό πλαίσιο της εποχής και τη συνεπαγόμενη μερική μόνον χρησιμότητα των συμπερασμάτων, γίνεται ένα βήμα προς τη σωστή κατεύθυνση: να παγιωθούν οι αξιολογήσεις των εποπτευόμενων από την ΓΓΕΤ Ινστιτούτων ως αναπόσπαστο τμήμα της ερευνητικής καθημερινότητας.

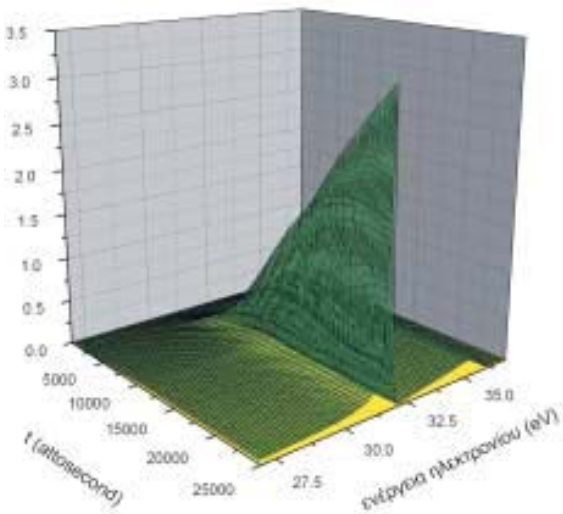
Την ίδια περίοδο προκηρύσσεται η θέση του Διευθυντή ΙΘΦΧ κατ' εφαρμογή του Ν. 1514/1985. Εκλέγεται ο Ευστράτιος Μανουσάκης, καθηγητής Θεωρητικής Φυσικής στο Florida State, αναλαμβάνει υπηρεσία τον Μάιο

του 1995, αλλά δεν εγκαθίσταται στην Ελλάδα και παραιτείται, τελικά, μετά ένα έτος. Το Ινστιτούτο διευθύνει προσωρινά, ως αναπληρωτής, ο Γ. Κ. Παπαβασιλείου. Κατά τη διάρκεια της θητείας του προσλαμβάνονται οι ερευνητές Αλίκη Βεγίρη (Maryland), που ασχολείται με μοριακή δυναμική, και Γιώργος Μούσδης («Δημόκριτος»), συνθετικός χημικός.

Η παρατεταμένη περίοδος προσαρμογής στο νέο θεσμικό πλαίσιο έχει περιορισμένες επιπτώσεις στην επιστημονική παραγωγικότητα του ΚΘΦΧ (που θα μετονομασθεί σε ΙΘΦΧ). Όμως, στη δεκαετία που έχει μεσολαβήσει, έχει αλλάξει ριζικά ο τρόπος χρηματοδότησης της έρευνας. Τα κονδύλια του ΕΙΕ που διαθέτονταν στα Ινστιτούτα και κατανέμονταν στα ερευνητικά τους Προγράμματα με ευθύνη του Διευθυντή, έχουν μηδενιστεί. Ένα νέο σχήμα χρηματοδότησης προβάλλει με τη στήριξη της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Ανεξάρτητα

έργα μεσοπρόθεσμης διάρκειας έχουν αντικαταστήσει αυτό που, εσφαλμένα, αποκλήθηκε «μη στοχοθετημένη έρευνα». Η επιτυχής διεκδίκηση πόρων στο ανταγωνιστικό αυτό περιβάλλον αποτελεί πλέον προϋπόθεση για αποδοτική ερευνητική εργασία ατόμων και ομάδων. Ο νέος τρόπος χρηματοδότησης προμολοτεί την εφαρμοσμένη έρευνα και ενέχει στοιχεία γραφειοκρατίας, αλλά και νέες ευκαιρίες ανάπτυξης και εξωστρέφειας. Το Ινστιτούτο, παρά τις επιστημονικές του επιδόσεις, δύσκολα προσαρμόζεται στη νέα αυτή πραγματικότητα και, ως εκ τούτου, πάσχει από έλλειψη πόρων. Στα τέλη του 1996 εκτελούνται 12 έργα εξωτερικής χρηματοδότησης. Οι μέσες ετήσιες εισροές από αυτές τις πηγές κατά την δεκαετία 1990-1997 αντιστοιχούν σε ποσοστό 32% της ετήσιας χρηματοδότησης από τον τακτικό προϋπολογισμό του ΕΙΕ (δηλ. την επιχορήγηση μέσω της ΓΓΕΤ) που, όμως, μόλις και μετά βίας αρκεί πλέον για τη μισθοδοσία του τακτικού προσωπικού.

Στην κρίσιμη αυτή καμπή, η διαδικασία προκήρυξης της θέσης του Διευθυντή ΙΘΦΧ επαναλαμβάνεται. Εκλέγεται ο Ε. Καμίτσος, που αναλαμβάνει τα καθήκοντά του τον Οκτώβριο του 1997.



Υπολογισμένη κατανομή πιθανότητας αυτοϊονιζομένων ηλεκτρονίων, η οποία προκύπτει όταν το άτομο του Al αλληλεπιδράσει με ένα παλμό laser διάρκειας 11 femtosecond ( $1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$ ) και ενέργειας φωτονίου 132 eV. Η αλληλεπίδραση προκαλεί φωτοϊονισμό και την ταυτόχρονη διέγερση των εσωτερικών ηλεκτρονίων που απομένουν. Η ενεργειακή κατανομή των ηλεκτρονίων, που μελετάται συναρτήσει του χρόνου με διακριτική ικανότητα 1.5 attosecond ( $1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$ ), εμφανίζει μέγιστο στα 31.7 eV και ασυμμετρία που οφείλεται στη συμβολή χβαντικών καταστάσεων.

## Η εξέλιξη του ΙΘΦΧ στο νέο περιβάλλον έρευνας (1997-2007)

### Δεδομένα και στρατηγικές επιλογές

Στα τέλη του 1996 το Ινστιτούτο απασχολεί 19 ερευνητές, 4 μεταδιδακτορικούς συνεργάτες, 5 μεταπτυχιακούς υποτρόφους, 4 τεχνικούς και 2 γραμματείς και οι δραστηριότητές του εκτείνονται σε οκτώ (τέσσερα θεωρητικά και τέσσερα πειραματικά) ερευνητικά πεδία.

Το νέο περιβάλλον της έρευνας είναι ανταγωνιστικό, σε εθνικό και διεθνές επίπεδο, και καλεί για συνέργειες και δράσεις σε νέες διεπιστημονικές κατευθύνσεις. Η δυνατότητα επιτυχούς συμμετοχής στο νέο αυτό πλαίσιο θα στηριχθεί στη χάραξη νέας στρατηγικής, που περιλαμβάνει επανασχεδιασμό της ερευνητικής πολιτικής του ΙΘΦΧ, διάχυση και επιμερισμό αρμοδιοτήτων και ενεργοποίηση όλων των δυνάμεων του Ινστιτούτου. Με δεδομένο ότι οι ελάχιστες προσλήψεις νέων ερευνητών επαρκούν μόνον εν μέρει για την υλοποίηση νέων στρατηγικών επιλογών (νανοδομημένα υλικά με υψηλή λειτουργικότητα, φωτονική), αρκετές νέες δεξιότητες θα πρέπει να ανασυντεθούν και από τις υπάρχουσες.

Το ζητούμενο είναι η σταδιακή ενσωμάτωση δράσεων που θα αναδείξουν και την τεχνολογική συνιστώσα





● 164

Τρισδιάστατη απεικόνιση των φασματικών αλλαγών που παρατηρούνται με φασματοσκοπία εγγύς υπερόθρου (NIR) κατά την προοδευτική αφυδάτωση ειδικών ηλιόμορφων ορυκτών με νανοσκοπικά δομικά χαρακτηριστικά. Ο οριζόντιος άξονας αντιστοιχεί στη συχνότητα του φωτός, ο κάθετος στην πρόοδο της διεργασίας, και οι αποχρώσεις του κόκκινου στην ένταση των παρατηρούμενων φασματικών κορυφών. Η επιφάνεια που σχηματίζεται, εικονογραφεί την ποικιλία των δομικών θέσεων που καταλαμβάνονται από μόρια νερού και τις αλλαγές που αυτές υφίστανται κατά την αφυδάτωση. Η γνώση των δομικών αυτών θέσεων είναι καθοριστική για τις ιδιότητες και τις εφαρμογές των υλικών. Χάρη στο επιστημονικό της περιεχόμενο και την ιδιαίτερη αισθητική, η εικόνα αποτελεί το λογότυπο του Εργαστηρίου Φασματοσκοπικών Εφαρμογών του ΙΘΦΧ που παρέχει ερευνητικές υπηρεσίες προς τρίτους.

της έρευνας, χωρίς να αποδυναμώσουν τη θεμελιώδη γνώση που παράγεται στο ΙΘΦΧ. Τούτο είναι ιδιαίτερα σημαντικό, γιατί τη δεκαετία αυτή η ανάπτυξη νέας ερευνητικής υποδομής στο Ινστιτούτο και η χρηματοδότηση μεταπτυχιακών και μεταδιδακτορικών συνεργατών θα στηριχθεί αποκλειστικά σε πόρους που εξασφαλίζονται από διαρθρωτικά και ανταγωνιστικά ευρωπαϊκά προγράμματα, από διμερείς επιστημονικές συνεργασίες, καθώς και από την παροχή ερευνητικών υπηρεσιών και εκτέλεση έργων εφαρμοσμένης έρευνας, σε συνεργασία με βιομηχανικούς φορείς της χώρας και του εξωτερικού.

Η εντατικοποίηση της προσπάθειας των ερευνητών του Ινστιτούτου για ανάπτυξη συνεργασιών με διακε-

κριμένες ερευνητικές ομάδες της χώρας και του εξωτερικού και για αποτελεσματική διεκδίκηση ερευνητικών έργων εξωτερικής χρηματοδότησης, υπήρξε καταλυτική για την εξέλιξη του στα επόμενα χρόνια. Τα θετικά αποτελέσματα υπήρξαν πολλαπλά: στο παραγόμενο επιστημονικό έργο, στην εξασφάλιση πόρων για τις αναπτυξιακές δαπάνες του Ινστιτούτου και στη δυνατότητά του να εκπαιδεύσει μεταπτυχιακούς και μεταδιδακτορικούς συνεργάτες.

Στο τέλος αυτής της δεκαετίας (μέσος όρος 2003-2007) οι μέσες ετήσιες εισροές από εξωτερική χρηματοδότηση αντιστοιχούν σε ποσοστό 97% της τακτικής επιχορήγησης. Σε σύνολο 40 εκτελούμενων έργων εξω-

τερικής χρηματοδότησης (τέλη 2007), τα 7 αφορούν μια νέα κατηγορία, συμβάσεις με βιομηχανικούς φορείς και παροχή ερευνητικών υπηρεσιών προς τρίτους. Ο αριθμός των μεταπτυχιακών και μεταδιδακτορικών συνεργατών υπερτριπλασιάζεται –αριθμώντας στο τέλος του 2007 πάνω από τριάντα νέους επιστήμονες– αν και το τακτικό προσωπικό του Ινστιτούτου (20 ερευνητές, 2 τεχνικοί, 2 γραμματείς) παραμένει αριθμητικά αμετάβλητο εδώ και δύο περίπου δεκαετίες. Παράλληλα, το παραγόμενο επιστημονικό έργο, όπως απεικονίζεται στον μέσο ετήσιο αριθμό δημοσιεύσεων σε διεθνή περιοδικά με κριτές, εμφανίζει σαφή και σταθερή αύξηση.

Στις αρχές της δεκαετίας (1999) ορίστηκαν, με απόφαση του Επιστημονικού Συμβουλίου του ΕΙΕ, Συμβουλευτικές Επιστημονικές Επιτροπές (ΣΕΕ) στα Ινστιτούτα του. Στη ΣΕΕ του ΙΘΦΧ συμμετείχαν οι καθηγητές Γ. Θεοδώρου (Παν/μιο Θεσ/νίκης), Σ. Φαράντος (Παν/μιο Κρήτης), Δ. Παπακωνσταντόπουλος (NRL, Washington), Χ. Φλούδας (Princeton), M.S. Child (Oxford) και M.D. Ingram (Aberdeen). Η ΣΕΕ επισκέφθηκε το ΙΘΦΧ, ανέλυσε το έργο και τις προοπτικές του και υπέβαλε εκθέσεις στη Διοίκηση του ΕΙΕ με χρήσιμες προτάσεις για την καλύτερη προώθηση των στόχων του Ινστιτούτου.

### Ανάπτυξη υποδομών, ανασχεδιασμός και εξέλιξη ερευνητικών δραστηριοτήτων

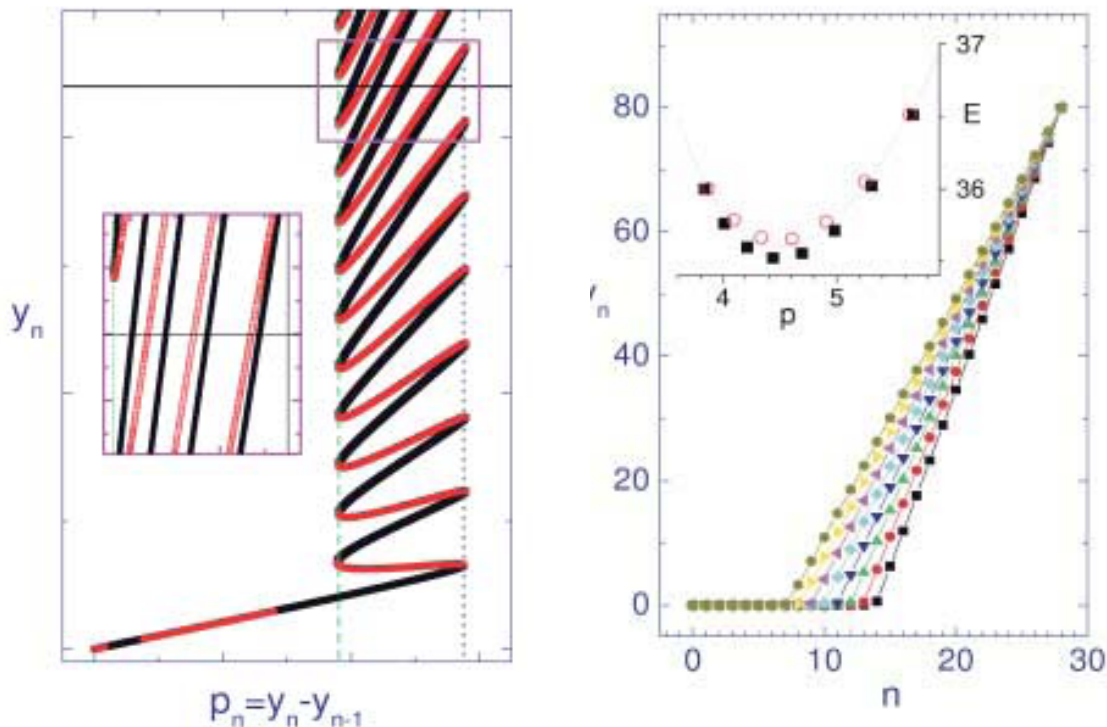
Μια πρώτη ώθηση στον επανασχεδιασμό των δράσεων του ΙΘΦΧ έδωσε το Έργο ενίσχυσης «Ερευνητικός Ιστός», που οδήγησε σε μερική αναβάθμιση των υποδομών του Ινστιτούτου.

Οι εμπειρίες που είχαν συσσωρευτεί από τις αρχές του 1990, μέσω γόνιμων και επωφελών συνεργασιών με την εγχώρια βιομηχανία, είχαν καταδείξει την ανάγκη δημιουργίας κατάλληλου «αγωγού» μεταφοράς τεχνολογίας, που αναπτύσσεται στο Ινστιτούτο, προς παραγωγικούς φορείς. Με απόφαση του Ινστιτούτου, το 1998 ιδρύεται Εργαστήριο Φασματοσκοπικών Εφαρμογών (ΕΦΕ) με στόχο να διερευνήσει τη δυνατότητα βιομηχανικής εφαρμογής της τεχνολογίας και της υποδομής που διαθέτει το ΙΘΦΧ στη δονητική φασματοσκοπία (υπερύθρου και Raman). Δραστηριοποιούνται, αρχικά, κυρίως οι ερευνητές Β. Γκιώνης και Γ. Χρυσικός προς την κατεύθυνση της οριζόντιας εφαρμογής της φασματοσκοπίας σε κατηγορίες υλικών οι οποίες δεν είχαν απαχολήσει ερευνητικά το Ινστιτούτο, όπως τα φάρμακα

και τα βιομηχανικά ορυκτά. Κομβικό σημείο υπήρξε η ένταξη στον «Ερευνητικό Ιστό» της αγοράς ενός φωτομέτρου εγγύς υπερύθρου (NIR) με μετασχηματισμό Fourier, που επιτρέπει τη γρήγορη μελέτη μεγάλου αριθμού δειγμάτων με απολύτως μη καταστροφικό τρόπο, ακόμα και σε βιομηχανικό περιβάλλον. Παράγονται τεράστιες βάσεις δεδομένων που αναλύονται με χημειομετρικούς αλγόριθμους. Εξίσου σημαντική για τη μελέτη βιομηχανικών και βιολογικών δειγμάτων ήταν η προμήθεια ενός φωτομέτρου Raman με μετασχηματισμό Fourier και διέγερση στα 1.06 nm, επίσης από τον «Ερευνητικό Ιστό». Το ΕΦΕ σχεδιάστηκε εξαρχής για να παρέχει ερευνητικές υπηρεσίες, ώστε να μην ανταγωνίζεται τα ιδιωτικά εργαστήρια μετρήσεων. Η δράση του εργαστηρίου έχει σήμερα διευρυνθεί, συμβάλλει στην οικονομική στήριξη της έρευνας στο ΙΘΦΧ από υγιείς πηγές χρηματοδότησης, και είναι πλέον σε θέση να ανατροφοδοτήσει ερευνητικές δραστηριότητες με νέα προβλήματα βασικής έρευνας. Αρκετά αργότερα, τα έργα παροχής ερευνητικών υπηρεσιών που υλοποιεί το ΕΦΕ θα αποτελέσουν κριτήριο χρηματοδότησης μέσω του



Φωτόμετρο σκέδασης φωτός με γωνιόμετρο μεταβαλλόμενης γωνίας στα εργαστήρια του ΙΘΦΧ. Αποκτήθηκε το 2006 και αποτελεί το πρώτο συμπαγές σύστημα της κατηγορίας του στην Ελλάδα. Καθιστά δυνατή την πραγματοποίηση μετρήσεων στατικής και δυναμικής σκέδασης φωτός για την εύρεση του μοριακού βάρους, του μεγέθους και της κατανομής μεγεθών συνθετικών πολυμερών, βιολογικών μακρομορίων και ανόργανων / οργανικών νανοσωματιδίων σε διασπορά.



● 166

Μη γραμμικές απεικονίσεις της χαοτικής δυναμικής σε χρήση στη Βιολογική Φυσική. Η απόσταση  $y_n$  που χωρίζει το  $n$ -ιοστό ζεύγος βάσεων στη διπλή αλυσίδα του DNA, περιγράφεται σαν συνάρτηση των αποστάσεων των δύο προηγούμενων (αριστερά). Η μέθοδος οδηγεί στην εύρεση στατικών μη γραμμικών διεγέρσεων (δεξιά), που περιγράφουν σχηματικά το προφίλ αποσυνδεδεμένων αλυσίδων. Οι ιδιότητες της ευσταθούς διεγερσης με την ελάχιστη ενέργεια (δεξιά, ένθετο) προσδιορίζουν τις λεπτομέρειες της θερμικής αποσύνδεσης των αλυσίδων του DNA (Phys. Rev. Lett. 93, 258101, 2004).

Προγράμματος «ΑΚΜΩΝ» της ΓΓΕΤ, που θα συμβάλει σημαντικά στην ενίσχυση της υλικοτεχνικής υποδομής του Ινστιτούτου.

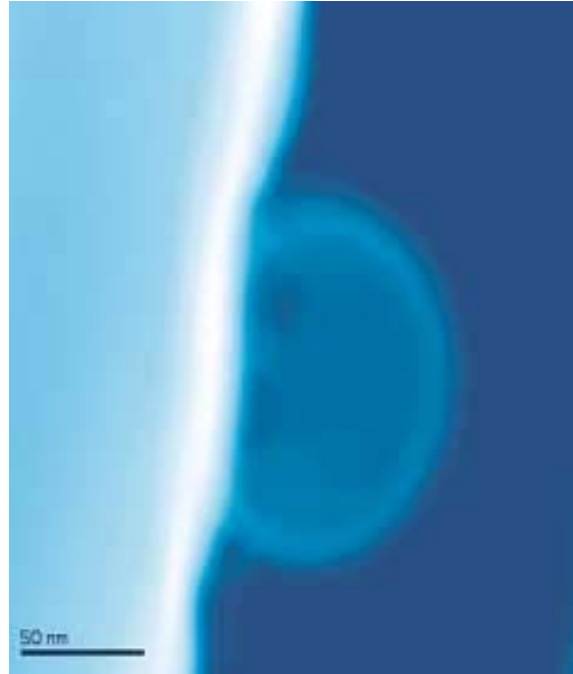
Οι δραστηριότητες των lasers ανασχεδιάζονται μέσω του Έργου «Ιστός». Η αναδιάταξη και επέκταση του υπάρχοντος εξοπλισμού από τον Μ. Κομπίτσα, επιτρέπει την ανάπτυξη και ενσωμάτωση νέων τεχνικών: του φορτισμού που επάγεται με laser με χρονική ανάλυση (TR-LIF) και της φασματοσκοπίας πλάσματος που επάγεται με

laser (LIPS). Πρόκειται για εξειδικευμένες τεχνικές στοιχειακής ανάλυσης, με καλή χωρική διακριτική ικανότητα, που ανοίγουν νέες κατηγορίες εφαρμογών. Η πρώτη εφαρμόζεται από τον Μ. Κομπίτσα στη μέτρηση της ρύπανσης από προϊόντα πετρελαίου σε παράκτιες περιοχές, και, σε συνδυασμό με τεχνικές τεχνητών νευρωνικών δικτύων, αποδεικνύεται ιδιαίτερα ισχυρή συγκρινόμενη με προηγούμενες μεθόδους ανάλυσης. Η τεχνική LIPS εφαρμόστηκε με επιτυχία στον ποσοτικό προσδιορισμό στοι-

χείων κραματοποίησης χαλύβων και αρχαίων νομισμάτων, στην ανάλυση δειγμάτων από τον βυθό του Αιγαίου, στην ανίχνευση ιχνοστοιχείων σε φάρμακα, και στη μέτρηση της περιεκτικότητας των καταλυτών που προορίζονται για ανακύκλωση σε ευγενή μέταλλα. Παράλληλα, σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε θάλαμος υψηλού κενού πολλαπλών χρήσεων που χρησιμοποιείται στην εναπόθεση λεπτών υμενίων με παλμικά laser (PLD). Εστιάζοντας ισχυρά παλμικά lasers σε μεταλλικούς ή κεραμικούς στόχους, δημιουργείται πλάσμα που εναποτίθεται σε υποστρώματα υπό μορφή οξειδίων πάχους 50-300 nm για εφαρμογές οπτο-ηλεκτρονικής. Μία καινοτόμος διάταξη PLD, που αναπτύσσεται στο Ινστιτούτο το 2005, επιτρέπει πλέον την ελεγχόμενη εμφύτευση προσμίξεων σε λεπτά υμένα, καθορίζοντας με τον τρόπο αυτό τις ηλεκτρικές, οπτικές και δομικές τους ιδιότητες. Αναπτύσσονται νανοδομές διαφόρων τύπων και ελέγχονται για τη λειτουργικότητά τους ως αισθητήρες για την ηλεκτροχημική ανίχνευση υδρογόνου, μεθανίου και άλλων αερίων στον αέρα. Οι δραστηριότητες αυτές αποτυπώνονται σε τρεις διδακτορικές διατριβές που βρίσκονται σε εξέλιξη και σε επτά προπτυχιακές και εργασίες εξειδίκευσης.

Ο Α.-Κ. Κεφαλάς θα εστιάσει από το 1997 τις δραστηριότητές του στη νανολιθογραφία στα 13 και 157 nm, καθώς και στην αξιολόγηση των δυνατοτήτων και των φυσικών ορίων των πολυμερών που χρησιμοποιούνται στις νέες τεχνολογίες. Με χρηματοδότηση από έργα της Ευρωπαϊκής Ένωσης ανανεώνεται ο εξοπλισμός του εργαστηρίου με laser στα 157 nm (Lamda Physik) και οπτικό μεταλλογραφικό μικροσκόπιο (Leika), καθιστώντας το, στη συνέχεια, κέντρο αξιολόγησης λιθογραφικών υλικών της ευρωπαϊκής βιομηχανίας μικροηλεκτρονικής (Arch, Infineon και Thomson). Παράλληλα, σε συνεργασία με το Ινστιτούτο Μικροηλεκτρονικής του «Δημόκριτου», το University of London και το Rutherford Appleton Laboratory, και με τη χρήση καταλλήλων πολυμερικών υλικών και νέων μεθόδων, επιτυγχάνεται για πρώτη φορά η απεικόνιση DNA βιολογικών οργανισμών in vivo με διακριτική ικανότητα στην κλίμακα του νανομέτρου. Ταυτόχρονα, διευρύνονται οι ερευνητικές συνεργασίες με άλλα ερευνητικά κέντρα (IMTE - Βέλγιο, Josef Stefan Institute - Σλοβενία, ENEA - Ιταλία και Sematech - ΗΠΑ).

Η υπολογιστική υποδομή του ΙΘΦΧ εμπλουτίζεται ουσιαστικά στις αρχές του 1998, μέσω του «Ερευνητικού Ιστού», με την προμήθεια 10 σταθμών εργασίας Pentium II, καθώς και περιφερειακού εξοπλισμού για σύνδεση με



Δύο μαγνητικοί νανοκρύσταλλοι Fe-Sm-Ta-N διαμέτρου 10 nm διακρίνονται σαφώς στο εσωτερικό μιας σταγόνας από γυαλί που τους προστατεύει από την οξείδωση. Έχουν αναπτυχθεί πάνω σε υπόστρωμα πυριτίου, που φαίνεται αριστερά με λευκό χρώμα, με τεχνικές παλμικής εναπόθεσης με laser στα 157 nm. Η συστηματική ανάπτυξη μαγνητικών υλικών σε μορφή υμενίων ή κόκκων με νανοσκοπικές διαστάσεις στο Εργαστήριο Φωτονικής και Νανοεφαρμογών του ΙΘΦΧ, εντάσσεται σε καινοτόμες εφαρμογές της νανο-ηλεκτρονικής.

το δίκτυο. Η επόμενη σημαντική υπολογιστική επέκταση γίνεται το 1999 και περιλαμβάνει την αναβάθμιση των προσωπικών υπολογιστών σε Pentium III, καθώς και την αγορά ενός ισχυρού Server ES40 της Compaq που διαθέτει τρεις επεξεργαστές AXP 500 MHz. Το 2005 αγοράζονται, με πόρους του Ινστιτούτου, 15 νέοι σταθμοί εργασίας Pentium IV. Με την ένταξη στο έργο «Αριστεία σε Ερευνητικά Ινστιτούτα» (βλ. παρακάτω) αποκτάται σύστημα αρχιτεκτονικής Grid, της Sun Microsystems, αποτελούμενο από 15 κόμβους Sun X4100 με δύο επεξεργαστές AMD Opteron διπλού πυρήνα.

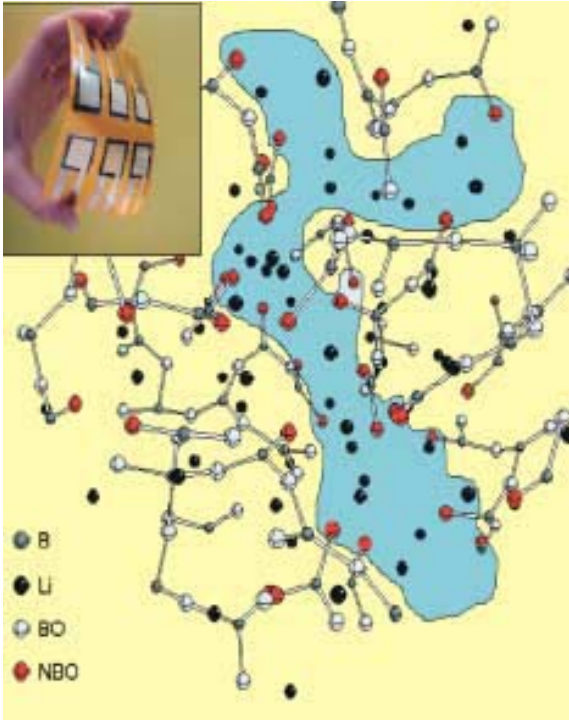


*Επίδειξη της λειτουργίας ολογραφικής δομής, που χαρακτήριζε σε λεπτό υμένιο οξειδίου πάνω σε γυάλινο υπόστρωμα (φαίνεται σε πρώτο πλάνο δεξιά). Ο ειδικός σχεδιασμός των δομών στο Εργαστήριο Φωτονικής και Νανοεφαρμογών του ΙΘΦΧ, στοχεύει στην παραγωγή κυματομετώπων φωτός με επιλεγόμενη κατανομή έντασης και φάσης. Η λειτουργικότητα των οπτικών αυτών στοιχείων επιτρέπει τη χρήση τους σε διατάξεις οπτικής σύζευξης, νευρωνικών δικτύων, επεξεργασίας εικόνων και φωτονικών αισθητήρων.*

Το επιστημονικό δυναμικό του ΙΘΦΧ ενισχύεται με νέο προσωπικό και ανοίγονται νέες κατευθύνσεις έρευνας. Το 2000 προσλαμβάνεται ο Νίκος Βάινος, μέχρι τότε ερευνητής στο Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Laser του ΙΤΕ στην Κρήτη, με στόχο να αναπτύξει περαιτέρω

τη δραστηριότητα της Φωτονικής και να ενισχύσει τις εφαρμογές της. Συνδυάζοντας τις δυνατότητες του Ινστιτούτου στη σχεδίαση, σύνθεση και μελέτη νέων υλικών, και εισάγοντας καινοτόμες ιδέες σε επίπεδο λειτουργικών δομών και διατάξεων, ο Ν. Βάινος εστιάζει στρατηγικά σε τομείς των τεχνολογιών της πληροφορίας, και στην ανάπτυξη οπτοηλεκτρονικών συστημάτων αισθητήρων, επεξεργασίας πληροφοριών και μετρολογίας. Με την προσέλκυση εξωτερικής χρηματοδότησης από ανταγωνιστικά έργα έρευνας, αρχίζει, παράλληλα, και η ανάπτυξη σημαντικής εργαστηριακής υποδομής. Σχεδιάζεται η ριζική διαμόρφωση του χώρου του ΙΘΦΧ στο υπόγειο του κτηρίου του ΕΙΕ και αρχίζει η κατασκευή εργαστηρίου φωτονικής στείρου χώρου (Class 1000), το οποίο ολοκληρώνεται και τίθεται σε λειτουργία το 2005. Περιλαμβάνει πειραματικούς σταθμούς σε οπτικές αντικραδαμικές τράπεζες, οπτικά, ηλεκτρονικά και αναλυτικά συστήματα, καθώς και αυτοματοποιημένο σύστημα περιβαλλοντικού λειτουργικού ελέγχου φωτονικών αισθητήρων, και παρέχει δυνατότητες σχεδίασης και διαμόρφωσης υλικών και διατάξεων και ολοκλήρωσης συστημάτων. Στόχος είναι οι εφαρμογές σε νευραλγικούς τομείς της βιομηχανίας, του περιβάλλοντος, της υγείας και της ασφάλειας. Οι δραστηριότητες του εργαστηρίου φωτονικής οδήγησαν στην ανάπτυξη καινοτομικών φωτονικών αισθητήρων σημείου για την «εκ-του-μακρόθεν» ανίχνευση φυσικών και χημικών παραμέτρων (θερμοκρασία, υγρασία, αέρια), καθώς και μετρολογικών συστημάτων. Στις δράσεις του εργαστηρίου εντάσσονται αρκετές μεταπτυχιακές εργασίες, καθώς και η διδακτορική διατριβή της Άννας Τσιγάρα (Ανάπτυξη και επεξεργασία σύνθετων νανοσκοπικών δομών και μελέτη των ιδιοτήτων τους για φωτονικές εφαρμογές, 2007), ενώ βρίσκονται σε εξέλιξη τρεις ακόμα διδακτορικές διατριβές στον τομέα των νανοφωτονικών δομών και κβαντικών συστημάτων. Το 2005 ο Ν. Βάινος εκλέγεται αναπληρωτής καθηγητής στο Πανεπιστήμιο Πατρών και συνεχίζει τις δραστηριότητες του στο ΙΘΦΧ ως συνεργαζόμενο μέλος ΔΕΠ. Το εργαστήριο φωτονικής διοργάνωσε το 2006 με επιτυχία το Final Workshop της δράσης COST P8, «Materials and Systems for Optical Data Storage and Processing».

Η κατεύθυνση της σύνθεσης και μελέτης της δομής των υάλων με φασματοσκοπικές τεχνικές, και της δυναμικής τους με διηλεκτρική εμπέδηση, θα ενισχυθεί το 2000 με την εκλογή του φυσικού Χρήστου Βαρσάμη (La Sapienza). Η δραστηριότητα αυτή θα διευρυνθεί περαιτέρω με τη συνεργασία της Α. Βεγίρη στην προσομοίωση της δομής ιοντικών υάλων με τεχνικές μοριακής δυναμι-



Διδιάστατη απεικόνιση της ατομικής δομής βορικής υάλου λιθίου, όπως προέκυψε από μελέτες μοριακής δυναμικής και δονητικής φασματοσκοπίας. Οι φορείς φορτίου (ιόντα λιθίου, Li) αλληλεπιδρούν κυρίως με αρνητικά φορτισμένα άτομα οξυγόνου (NBO) και έχουν την τάση να σχηματίζουν «μικρο-διαύλους» (με γαλάζιο χρώμα στην εικόνα), που διατρέχουν το υαλώδες βορικό πλέγμα και οδηγούν σε υψηλή ιοντική αγωγιμότητα. Παρόμοια υαλώδη υλικά, τα οποία συνδυάζουν υψηλή ιοντική αγωγιμότητα με τη δυνατότητα ανάπτυξής τους υπό μορφή χημικά σταθερών λεπτών υμενίων, είναι χρήσιμα σε ηλεκτροχημικές διατάξεις, όπως οι μικροσυσσωρευτές που απεικονίζονται στο ένθετο της εικόνας. Η έρευνα του ΙΘΦΧ στο πεδίο αυτό γίνεται σε συνεργασία με πολλές ευρωπαϊκές ομάδες σε ακαδημαϊκούς και βιομηχανικούς φορείς και χρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση.

κής. Αργότερα, άλλο ένα μέλος της ομάδας των θεωρητικών χημικών, ο Μ. Σημαντήρας, θα ασχοληθεί με τον *ab initio* υπολογισμό της ηλεκτρονιακής δομής υάλων και ανόργανων συσσωματωμάτων, επιβλέποντας το διδακτορικό του Δημήτρη Λιάκου (Θεωρητικοί υπολογισμοί σε ανόργανα υλικά, 2007).

Οι Γ. Κ. Παπαβασιλείου και Γ. Μούσδης συνέχισαν τη δραστηριότητά τους στην ανάπτυξη και στον χαρακτηρισμό οργανικών, μεταλλοργανικών και οργανικών-ανόργανων υβριδικών ενώσεων, που σχηματίζουν χαμηλοδιάστατες υπερμοριακές δομές σε μορφή κρυστάλλων ή λεπτών υμενίων. Τα υλικά αυτά παρουσιάζουν τεχνολογικά ενδιαφέροντες ηλεκτρικές, οπτικές, ηλεκτροοπτικές και μαγνητοηλεκτρονικές ιδιότητες. Η λειτουργικότητά τους ποικίλλει ανάλογα με το ενεργό τους μέρος, το οποίο μπορεί να είναι το οργανικό (αγώγιμα και υπεραγώγιμα υλικά) ή το ανόργανο (χαμηλοδιάστατα ημιαγώγιμα υλικά). Η δραστηριότητα αυτή οδήγησε στην παρασκευή πληθώρας νέων υλικών, που μελετώνται και σε συνεργασία με άλλα εργαστήρια σε Ευρώπη, ΗΠΑ και Ιαπωνία. Στο πεδίο αυτό έχει ολοκληρωθεί ένα δίπλωμα εξειδίκευσης και ευρίσκονται σε εξέλιξη δύο διδακτορικές διατριβές.

Ο Γ. Πετσαλάκης και η Ι. Θεοδωρακοπούλου ασχολούνται από το 2002 με τη θεωρητική ερμηνεία της αυτοοργάνωσης μορίων πάνω σε επιφάνειες πυριτίου. Η έρευνα αφορούσε τα πειραματικά αποτελέσματα που είχε συγκεντρώσει η ομάδα του J. C. Polanyi (Toronto, Βραβείο Nobel Χημείας 1986) με τεχνικές ηλεκτρονικής μικροσκοπίας υψηλής ανάλυσης, και είχε στόχο τον σχεδιασμό «εκτυπωτών μοριακής ακρίβειας» για εφαρμογές μικρο/νανο-ηλεκτρονικής. Πέρα από το ειδικό ενδιαφέρον της συγκεκριμένης εφαρμογής, το Ινστιτούτο διαθέτει πλέον την τεχνογνωσία υπολογισμών σε μεγάλα συστήματα, έως και 200 ατόμων, που θα αποδειχθεί πολύτιμη στο μέλλον.

Με την επίβλεψη του Μ. Μπακάλη, ο Zhuang Xiong εκπονεί τη διδακτορική του διατριβή (*Low-lying atomic excitation spectrum via global optimization of the wave function - an atomic configuration interaction via generalization of Laguerre type orbitals*, 2002). Η χρήση τροχιακών προσεγγισμένης περιγραφής θα επεκταθεί, σε συνεργασία με τον Α. Μητρόπουλο και τον Δ. Παπακωνσταντόπουλο (NRL), σε καταλυτικές αντιδράσεις συσσωματωμάτων αλουμινίου και μικρών μορίων.

Η ομάδα που καλλιεργεί το πεδίο της Ατομικής και Μοριακής Φυσικής (Κομνηνός, Μερκούρης, Νικολαΐδης) συνεχίζει τη συστηματική μελέτη της δυναμικής των καταστάσεων ατόμων και μορίων, με εργαλεία τη θεωρία καθορισμένης κατάστασης (state specific theory) και τους σχετικούς υπολογιστικούς κώδικες που έχει αναπτύξει. Παρακολουθώντας τις διεθνείς εξελίξεις, επεκτείνει τη δραστηριότητά της στη θεωρητική μελέτη της απόκρισης πολυηλεκτρονικών ατόμων και μορίων σε



Γραμμή υψηλού κενού στα εργαστήρια του ΙΘΦΧ για τη σύνθεση πολυσυσταδικών μακρομορίων με τη μέθοδο του ανιοντικού πολυμερισμού. Τέτοιου είδους μακρομόρια επιτρέπουν την ανάπτυξη ανόργανων-οργανικών υβριδικών υλικών, διασπορών νανοσωματιδίων, φορέων ελεγχόμενης αποδέσμευσης φαρμάκων και άλλων εφαρμογών.

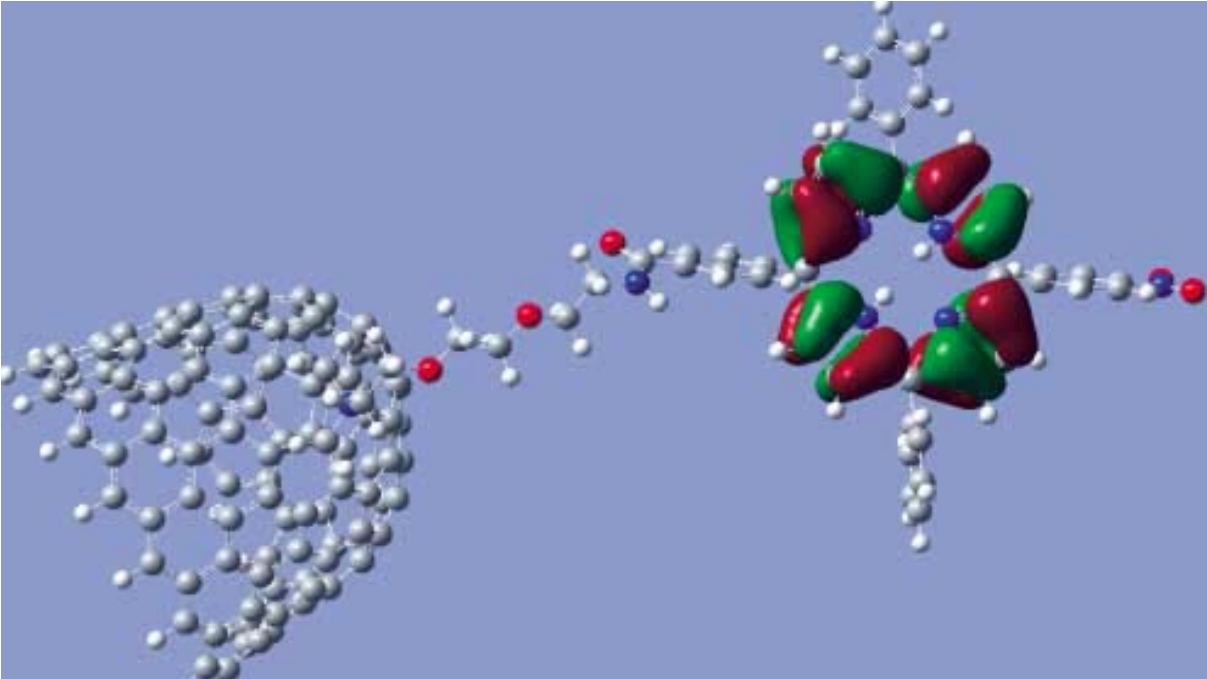
ισχυρά πεδία laser, και, πρόσφατα, ασχολείται με θεωρητικές πλευρές υπερταχειών διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα σε χρονικές κλίμακες attosecond ( $1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$ ). Πρόκειται για ένα εντελώς νέο ερευνητικό πεδίο, που αναδύθηκε διεθνώς τα τελευταία επτά χρόνια με τη δημιουργία παλμών συμφώνου φωτός διάρκειας μερικών εκατοντάδων attoseconds και φέρνει την επιστήμη κοντά στο όριο να «δει» την κίνηση των ηλεκτρονίων!

Μια σειρά από διδακτορικές διατριβές αποκαλύπτουν την ειδικότερη θεματική εξέλιξη αυτής της ερευνητικής κατεύθυνσης: Σταυρούλα Διονυσοπούλου, *Μελέτη χρονοεξαρτώμενων πολυφωτονικών διαδικασιών κατά την αλληλεπίδραση ατόμου με παλμό laser ισχυρής έντασης και μικρής χρονικής διάρκειας*, 1998· Μανώλης Θραψανιώτης, *Χρήση ολοκληρωμάτων διαδρομών και ευσταθών χβαντικών καταστάσεων για την μελέτη της αλληλεπίδρασης της ύλης με σύμφωνη και συμπιεσμένη ακτινοβολία*, 2000· Σπύρος Θέμελης, *Θεωρητική μελέτη και υπολογισμός χαρακτηριστικών ιδιοτήτων διπλά διηγερμένων καταστάσεων και του φαινομένου LoSurdo-Stark σε ατομικά συστήματα*, 2001· Κώστας Χαρίτος, *Θεωρία και υπολογισμός της ηλεκτρονιακής συσχέτισης στο συνεχές φάσμα. Απλός και διπλός ιονισμός*, 2003 και Θεοδόσιος Δουβρόπουλος, *Δυναμική χβαντικών συστημάτων και καταστάσεις συντονισμού*, 2005.

### Προγράμματα «Αριστείας»

Το 2000 διενεργείται η δεύτερη (άρα, εκ των πραγμάτων τακτική) αξιολόγηση του ΙΘΦΧ από εξωτερική επιτροπή με επικεφαλής τον Β.Μ. Rode, καθηγητή στο Innsbruck. Η εισήγηση της επιτροπής περιλαμβάνει προτάσεις για την επέκταση της υπολογιστικής έρευνας προς μεγαλύτερα συστήματα. Το ΙΘΦΧ ανταποκρίνεται συντάσσοντας ένα στρατηγικό σχέδιο για τη μελλοντική του ανάπτυξη, το οποίο υποβάλλεται προς αξιολόγηση στη ΓΓΕΤ. Το σχέδιο «Νανοδομημένα ανόργανα και οργανικά-ανόργανα υβριδικά υλικά» προβλέπει την εστίαση της ερευνητικής προσπάθειας γύρω από τον σχεδιασμό υλικών με νανοσκοπικές διαστάσεις και καινοτόμες λειτουργικότητες, καθώς και την κατανόηση των βασικών αρχών που τα διέπουν. Η αξιολόγηση και έγκριση του σχεδίου από νέα εξωτερική επιτροπή υπό τον καθηγητή J. Roovers (NRC, Ottawa, Canada) και η ένταξή του από τη ΓΓΕΤ στο Πρόγραμμα «Αριστεία» υπήρξε καταλυτική για τις εξελίξεις, ενισχύοντας τις συνέργειες μεταξύ πειραματικών και θεωρητικών ομάδων του Ινστιτούτου, σε έναν εστιασμένο ερευνητικό άξονα με έμφαση στα υλικά και τις σύγχρονες εφαρμογές τους.

Στο πλαίσιο της «Αριστείας», εισάγονται, το 2002, στη φαρέτρα του Ινστιτούτου τα δισυσταδικά πολυμερή ως νέο αντικείμενο έρευνας. Πρόκειται για υλικά ελεγχόμενης σχεδίασης, τα οποία, σε διάλυμα ή στη στερεά κατάσταση, έχουν την ικανότητα να αυτοοργανώνονται σε νανοδομές. Προσλαμβάνεται ως επιστημονικός συνεργάτης ο Στέργιος Πίτσας (Πανεπιστήμιο Αθηνών) με μεγάλη εμπειρία στο πεδίο, και στη συνέχεια εκλέγεται

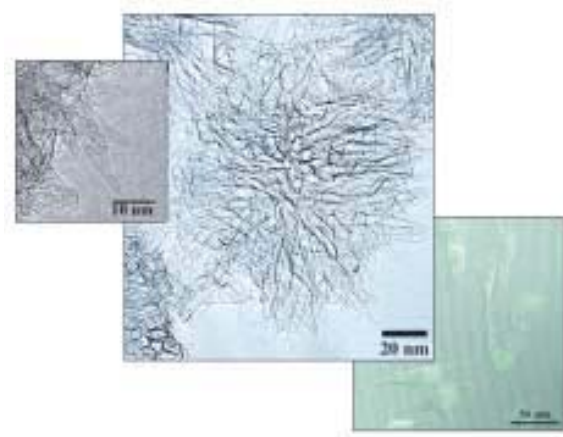


*Η μοναδική δομή της ακίδας των νανοκεράτων άνθρακα, επιτρέπει την επιλεκτική χημική πρόσδεση σε αυτήν μορίων, με ιδιαίτερες οπτικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες. Η εικόνα αποτυπώνει ένα από τα μοριακά τροχιακά που συμμετέχουν στις διεγερμένες καταστάσεις ενός πολύπλοκου συστήματος, που περιλαμβάνει την ακίδα (αριστερά) και έναν πορφυρινικό δακτύλιο (δεξιά). Το σύστημα έχει σχεδιαστεί στο ΙΘΦΧ ώστε να επιτρέπει τη διέγερση του δακτυλίου με απορρόφηση ορατού φωτός και τη μεταφορά ηλεκτρονίου στην ακίδα. Οι υπολογισμοί της ηλεκτρονιακής πυκνότητας είναι ιδιαίτερα απαιτητικοί, διότι το σύστημα περιλαμβάνει περίπου 200 άτομα, αλλά είναι απαραίτητοι για την κατανόηση και βελτιστοποίηση των μηχανισμών μεταφοράς φορτίου. Το σύστημα αποτελεί αντικείμενο εντατικής πειραματικής και θεωρητικής μελέτης στο Ινστιτούτο, με στόχο την ανάπτυξη νέων φωτοβολταϊκών υλικών υψηλής απόδοσης.*

ερευνητής το 2004. Οργανώνεται ένα νέο εργαστήριο σύνθεσης και συμπληρώνεται με τον απαιτούμενο εξοπλισμό για τον χαρακτηρισμό των πολυμερών. Η δονητική φασματοσκοπία χρησιμοποιείται ως εργαλείο αναγνώρισης των χημικών αλληλεπιδράσεων που διέπουν την αυτοοργάνωση. Λίγο νωρίτερα έχει αγοραστεί ένα νέο φωτόμετρο υπεριώδους (Bruker Equinox 55) με διάταξη εσωτερικής ανάκλασης, πάνω στο οποίο αναπτύσσονται διατάξεις για την παρακολούθηση των διεργασιών σε πραγματικό χρόνο. Οι δυνατότητες θα συμπληρωθούν αργότερα με την αγορά ενός σύγχρονου φωτομέτρου σκέδασης φωτός.

Οι ιδιότητες αυτοοργάνωσης των δισυσταδικών πολυμερών θα συνδυαστούν γόνιμα με άλλες πειραματικές δράσεις, κυρίως αυτές που αφορούν την ανάπτυξη και τον χαρακτηρισμό ανόργανων-οργανικών υβριδικών υλικών με προηγμένη λειτουργικότητα. Πέρα από την καινούργια βασική γνώση που προσφέρει η μελέτη τους, τα καινοτόμα νανοδομημένα υβριδικά υλικά σχεδιάζονται για να χρησιμοποιηθούν ως ενεργές συνιστώσες σε διατάξεις αισθητήρων αερίων ή ως στερεοί πολυμερικοί ηλεκτρολύτες σε μικροσυσσωρευτές νέας γενιάς. Παράλληλα, αναπτύσσονται υβριδικά λεπτά υμένια βασισμένα σε οργανικές πολυμερικές μήτρες που περιέχουν





Καθαρός άνθρακας σε σχηματισμό «άνθους ντάλιας» με διάμετρο περίπου 80 nm. Τα πέταλα καταλήγουν σε κώνους (νανοκέρατα, αριστερά σε μεγέθυνση) με μοναδική δομή από πενταμελείς δακτυλίους που τους προσδίδουν ιδιαίτερες χημικές ιδιότητες. Στο έγχρωμο ένθετο καταδεικνύεται με τη βοήθεια χρωστικής η συσσώρευση των νανοκεράτων στο εσωτερικό κυττάρων, γεγονός που τα καθιστά υποψήφια υλικά για τη στοχευμένη μεταφορά φαρμάκων στον οργανισμό.

● 172

ανόργανα νανοσωματίδια. Τα υμένα αυτά διαθέτουν ενδιαφέρουσες οπτικές και μαγνητικές ιδιότητες, απαραίτητες για πολλές κατηγορίες εφαρμογών.

Πέραν των δισυσταδικών πολυμερών, η αυτοοργάνωση αποτελεί κύριο χαρακτηριστικό των βιολογικών μακρομορίων, με σημαντικό ενδιαφέρον. Ο δομικός χαρακτηρισμός των πρωτεϊνών με τεχνικές δονητικής φασματοσκοπίας διευρύνεται στο Ινστιτούτο, με απώτερο στόχο να αναδειχθεί σε εργαλείο σχεδιασμού και κατανόησης των ιδιοτήτων νέων υλικών. Σε συνεργασία με το Τμήμα Βιολογίας του Πανεπιστημίου Αθηνών, μελετάται, ιδιαίτερα από τον Γ. Χρυσικό και τον Β. Γκιώνη, η δευτεροταγής δομή πρωτεϊνών που μπορούν να σχηματίζουν αμυλοειδείς σχηματισμούς. Η κατεύθυνση αυτή διευρύνεται με τη μελέτη αυτο-οργανούμενων βιολογικών-συνθετικών μακρομοριακών υβριδικών συστημάτων, με σχετική διδακτορική διατριβή να βρίσκεται σε εξέλιξη. Από άλλη σκοπιά, ο Ν. Θεοδωρακόπουλος, αρχίζει να ασχολείται με τη στατιστική φυσική και την αυτοοργάνωση βιολογικών συστημάτων. Λαμβάνει μέρος σε ευρωπαϊκό δίκτυο μη

γραμμικής φυσικής και συνεργάζεται με τους καθηγητές Michel Peyrard (ENS-Lyon) και Robert S. Mackay (Warwick). Ένα από τα πρώτα αποτελέσματα που γνώρισε γρήγορα ευρεία αποδοχή ήταν η πρότυπη μεσοσκοπική περιγραφή της θερμικής αποσύνδεσης των δύο αλυσίδων του DNA ως ιδανικής μονοδιάστατης μετατροπής φάσεως. Η διδακτορική διατριβή του Jalal Errami, (*Modeling DNA hairpins*, 2007) επεκτείνει την κατανόηση πολυπλοκότερων δευτεροταγών δομών και της δυναμικής τους σε ανάλογα θεωρητικά πλαίσια.

Το 2004 εκλέγεται η Ευαγγελία Σαραντοπούλου σε θέση ερευνήτριας. Συνεργάζεται με τον Α. Κ. Κεφαλά και εγκαθίστούν στο Ινστιτούτο μικροσκόπιο ατομικών δυνάμεων (AFM), ενισχύοντας τη συμμετοχή του εργαστηρίου σε νέα σειρά ευρωπαϊκών έργων, όπου η νανοτεχνολογία συνδυάζεται με τη βιολογία. Στο πλαίσιο αυτό, αναπτύσσονται επιτυχώς DNA chips και microarrays και διερευνάται ο ρόλος ιονίζουσών και μη ιονίζουσών ακτινοβολιών στη θραύση του DNA. Ο εμπλουτισμός του εργαστηρίου με νέα όργανα και η πρόσβαση, μέσω συνεργασιών, σε μια νέα γενιά μικροσκοπίων με δυνατότητα απεικόνισης ατόμων, επιτρέπουν πλέον την κατανόηση βασικών φαινομένων μεταφοράς ενέργειας και μάζας, αλληλεπιδράσεων σε διεπιφάνειες και αυτοοργάνωσης συσσωματωμάτων σε επιφάνειες, τη σύνθεση οργανικών και ανόργανων νανομαγνητών, νανονιτριδίων μετάλλων και κραμάτων, καθώς και την επεξεργασία επιφανειών σε μοριακή κλίμακα με χρήση φωτός. Το νέο ατομικό μικροσκόπιο σήραγγας (Scanning Tunnelling Microscope) διευρύνει περαιτέρω τη δυνατότητα μοριακής επεξεργασίας και ανάλυσης της ύλης. Το εργαστήριο είναι πλέον, το 2008, έτοιμο να ξεκινήσει τη συμμετοχή του σε πείραμα στον Διεθνή Διαστημικό Σταθμό (ISS), σε συνεργασία με τον Ευρωπαϊκό Οργανισμό Διαστήματος, για τη μελέτη της επίδρασης ακτινοβολιών του διαστήματος στη βιολογική ύλη.

Την ίδια χρονιά (2004) ιδρύεται στο Ινστιτούτο το Εργαστήριο Φωτονικής και Νανοεφαρμογών (ΕΦΝ), με βασική συμμετοχή των Α.-Κ. Κεφαλά και Ν. Βάινου, και στόχο την παροχή υπηρεσιών υψηλής ποιότητας προς τρίτους και την προσέλκυση μεγάλων έργων έρευνας και ανάπτυξης στη φωτονική και τη νανοτεχνολογία. Το ΕΦΝ περιλαμβάνει τις υποδομές της φωτονικής και των νανοεφαρμογών με ακτινοβολία βαθέος υπεριώδους. Το πεδίο δράσης είναι πολύ ευρύ: από τη βιομηχανική μετρολογία έως την επεξεργασία υλικών με ακτινοβολία laser και τη βιοφωτονική. Οι σχετικές δραστηριότητες ενισχύονται με τη συνεργασία των Ε.



Ιανουάριος 2008, «οικογενειακή» φωτογραφία του ΙΘΦΧ στο αίθριο του ΕΙΕ. Καθισμένοι στην πρώτη σειρά, από αριστερά: Κλ. Νικολαΐδης, Γ. Κ. Παπαβασιλείου, Ν. Θεοδωρακόπουλος, Α.-Κ. Κεφαλάς, Ε. Καμίτσος, Θ. Μερκούρης, Γ. Πετσαλάκης, Γ. Κομνηνός και Μ. Κομπίτσας. Δεύτερη σειρά: Ν. Βάινος, Ε. Σαραντοπούλου, Δ. Παλλές, D. Mönke, Ε. Αρώνη, Ι. Θεοδωρακοπούλου, Γ. Ανυφαντής, Α. Μεριστούδη. Πίσω τους, όρθιοι: Α. Αθανασέκος, Ε. Ιωάννου, Α. Βέλλη, Μ. Καραγιάννη, Γ. Παγώνα, Β. Γκιώνης, Ε. Καδίτη, Ζ. Κόλλια, Κ. Πουλλή, Ε. Αλεξάνδρου, Π. Σεριάτου, Ι. Φασάκη, Μ. Σταματάκη, Μ. Dussauze. Τελευταία σειρά: Junpeng Zhao, Μ. Βασιλειάδης, Γ. Μανασής, Ν. Μακρής, Μ. Σημαντήρας, Γ. Χρυσικός, Γ. Ρώτας, Χ. Βαρσάμης, Α. Βεγίρη, Γ. Μούσδης, Χ. Θεοδωρικάκος, Στ. Πίσπας, Ν. Ταγματάρης, Χ. Μαντζαρίδης, G. Guimbretière.

Σαραντοπούλου, Ζ. Κόλλια, Γιάννη Μανασή και λοιπών συνεργατών. Το φως δεν αποτελεί μόνο το μέσο καταγραφής και διάδοσης πληροφορίας, αλλά και ένα εργαλείο μικρομηχανικής τροποποίησης της ύλης.

Η συσσωρευμένη εμπειρία στο Ινστιτούτο σε θέματα βασικής έρευνας στο πεδίο των υλικών, της φασματοσκοπίας και της φωτονικής, δημιουργεί πλέον τη βάση για επέκταση και σε περισσότερο εφαρμοσμένες κατευθύνσεις. Αρκετές από τις δραστηριότητες αυτές προσελκύουν χρηματοδότηση από ανταγωνιστικά έργα της Ευρωπαϊκής Ένωσης και στοχεύουν στην αξιολόγηση υλικών μικρο/νανολιθογραφίας σε μικρά μήκη κύματος φωτός (Α.-Κ. Κεφαλάς, Ε. Σαραντοπούλου, Ζ. Κόλ-

λια)· στην ανάπτυξη νέων πολυμερικών επιστρωμάτων με χαμηλή θερμοκρασία δικτύωσης (Γ. Χρυσικός, Β. Γκιώνης)· στην ανάπτυξη φωτονικών αισθητήρων με βάση νανο-δομημένα υλικά (Ν. Βάινος, Σ. Πίσπας, Γ. Μούσδης)· στην αναπαραγωγή αρχαίων μεσογειακών τεχνικών κεραμικής (Χ. Βαρσάμης, Β. Γκιώνης, Ε. Καμίτσος, Γ. Χρυσικός)· στη χρήση λεπτών υαλωδών υμενίων σε μικροσυσσωρευτές, μικροπυκνωτές και ηλεκτροχρωμικές διατάξεις (Χ. Βαρσάμης, Α. Βεγίρη, Ε. Καμίτσος, Γ. Χρυσικός) και στην ανάπτυξη υαλωδών και οργανικών-ανόργανων υβριδικών υλικών με μη-γραμμικές οπτικές ιδιότητες (Χ. Βαρσάμης, Α. Βεγίρη, Ε. Καμίτσος, Μ. Κομπίτσας, Σ. Πίσπας).



Η τεχνολογία του ΙΘΦΧ σε φασματοσκοπικές μεθόδους μηχανοκίνητης αξιολόγησης υλικών, χρησιμοποιήθηκε στο πλαίσιο έργου της Ευρωπαϊκής Ένωσης για την ανάλυση, ανάκτηση και αναβίωση αρχαίων και ιστορικών τεχνικών κεραμικής της Μεσογείου. Το Ινστιτούτο συντόνισε το έργο και συνεργάστηκε με ερευνητικές ομάδες από το Τμήμα Προϊστορίας και Αρχαιολογίας του Παν/μίου της Βαρκελώνης, το Κέντρο Ερευνών Marmara-TUBITAK της Κωνσταντινούπολης, το Ινστιτούτο Queen Rania του Παν/μίου Hashemite (Ιορδανία), το Τμήμα Λογοτεχνίας και Επιστημών του Ανθρώπου του Παν/μίου Mohammed I (Μαρόκο) και τη ΘΕΤΙΣ Authentics (Αθήνα). Στη φωτογραφία φαίνονται κεραμικές αναπαραγωγές του έργου, όπως παρουσιάστηκαν στην έκθεση «Κεραμικά της Μεσογείου», Λουτρό των Αέρηδων, Πλάκα (5-22 Μαΐου, 2006).

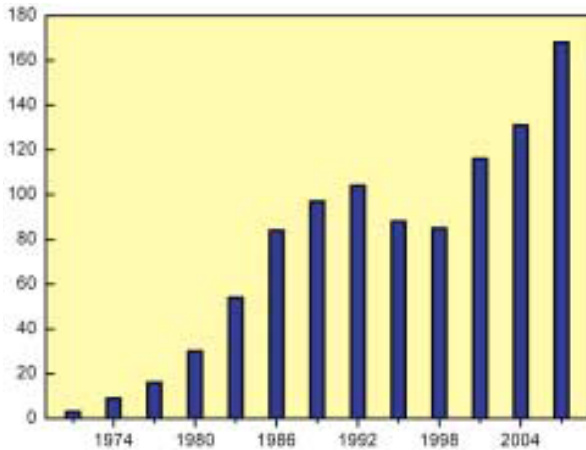
● 174

Οι κατευθύνσεις αυτές δημιουργούν και εμπεδώνουν γόνιμες συνεργασίες με πολλές ερευνητικές ομάδες σε ακαδημαϊκά και βιομηχανικά κέντρα της Ευρωπαϊκής Ένωσης. Παράλληλα, συνεχίζουν να προσελκύουν στο Ινστιτούτο μεταδιδακτορικούς συνεργάτες από χώρες της ΕΕ που συμβάλλουν στη μεταφορά τεχνολογίας στο ΙΘΦΧ (P. Machowski - Πολωνία, R. Todorov - Βουλγαρία, M. Dussauze - Γαλλία, M. Hands - Μ. Βρετανία, D. Möncke - Γερμανία, G. Guimbretiere - Γαλλία). Οι δραστηριότητες αυτές προσφέρουν, επιπλέον, τη δυνατότητα εκπαίδευσης σε νέους επιστήμονες, υποστηρίζοντας επτά διδακτορικές διατριβές που βρίσκονται σε εξέλιξη. Η συνδιοργάνωση, το 2004, στην Αθήνα του Διεθνούς Συνεδρίου 7th ESG Conference on Glass Science and Technology, με επιμέλεια των Πρα-

κτικών του από τους Ε. Καμίτσο, Χ. Βαρσάμη και Ν. Βάινο (Society of Glass Technology, Sheffield, 2005), αποτυπώνει τη συνεχιζόμενη διεθνή εμβέλεια της δραστηριότητας σε άμορφα και οργανικά-ανόργανα υβριδικά υλικά.

Η λειτουργία του Ινστιτούτου ως κέντρου «Αριστείας» στον τομέα των νανοδομημένων υλικών, υπήρξε καταλυτική για την επιλογή του ως «Κέντρου Υποδοχής Βραβείου EURYI 2004» (European Young Investigator Award), της ESF (European Science Foundation) και των EUROHORCS (European Union Research Organizations Heads of Research Councils). Ο Νίκος Ταγματάρχης γίνεται ο πρώτος Έλληνας που βραβεύεται με το βραβείο EURYI για την πρότασή του να ξεκινήσει στο ΙΘΦΧ ένα μακρόπνοο έργο που αφορά την επιφανειακή τροποποίηση νανοσωματιδίων άνθρακα. Η απονομή του βραβείου τυγχάνει ευρύτατης δημοσιότητας στον ελληνικό Τύπο και σε εξειδικευμένους δικτυακούς τόπους στη χώρα και στο εξωτερικό. Το βραβείο, που συνοδεύεται από μεγάλη χρηματοδότηση, επιτρέπει τη συστηματική προσπάθεια για τη χημική επιφανειακή τροποποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα, ώστε αυτοί να καταστούν διαλυτοί και συνεπώς χρήσιμοι σε τεχνολογικές εφαρμογές. Το ερευνητικό πεδίο εμπλουτίζεται με μια νέα αλλοτροπική μορφή του άνθρακα, τα νανοκέρατα. Πρόκειται για σφαιρικές υπερδομές με διάμετρο περίπου 80-100 nm που ομοιάζουν με το λουλούδι της ντάλιας. Τα «πέταλα» με τους γραφитικούς νανοσωλήνες τερματίζονται με ακίδες κωνικού σχήματος που αποτελούνται από 5 πενταμελείς δακτυλίους. Η μοναδική δομή των ακίδων, η ιδιαίτερη δευτεροταγής σφαιρική υπερδομή τους και η υψηλή καθαρότητά τους διαφοροποιούν τα νανοκέρατα από τους αντίστοιχους νανοσωλήνες άνθρακα και τους προσδίδουν εξαιρετικές δυνατότητες εφαρμογής σε φωτοβολταϊκά κύτταρα και κυψέλες καυσίμων. Το νέο αυτό πεδίο προσφέρει μεγάλες δυνατότητες γόνιμης συνεργείας μεταξύ πειραματικών και θεωρητικών δραστηριοτήτων του Ινστιτούτου (Ν. Ταγματάρχης, Γ. Πετσαλάκης, Ι. Θεοδωρακοπούλου), γεγονός που συνέτεινε και στην προσέλκυση σοβαρής χρηματοδότησης από την ΕΕ (7ο Π.Π.). Επιπλέον, υποστηρίζει την εκπόνηση δύο διδακτορικών διατριβών που είναι σε εξέλιξη και την εργασία τεσσάρων μεταδιδακτορικών συνεργατών.

Κατά τη διάρκεια της περιόδου αυτής λήγει η θητεία του Διευθυντή του ΙΘΦΧ. Μετά από νέα προκήρυξη εκλέγεται, τον Σεπτέμβριο του 2003, εκ νέου ο Ε. Καμίτσο.



Αριθμός δημοσιεύσεων του ΙΘΦΧ ανά τριετία σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά με κριτές (πηγές: ISI, Chemical Abstracts). Το ΙΘΦΧ προήλθε από τη συγχώνευση των προϋπαρχόντων Κέντρων Φυσιχοχημείας (ίδρυση 1968) και Θεωρητικής Χημείας (ίδρυση 1976), στα οποία και αντιστοιχούν οι προ του 1979 δημοσιεύσεις. Το ενιαίο ΙΘΦΧ έχει τις τελευταίες δύο δεκαετίες σχεδόν αμετάβλητο αριθμό ερευνητών (1988: 19, 1998: 19, 2008: 20).

Το 2005 είναι πάλι χρονιά εξωτερικής αξιολόγησης των Ερευνητικών Ινστιτούτων της χώρας που υπάγονται στη ΓΓΕΤ. Η αξιολόγηση του ΙΘΦΧ διενεργείται από ομάδα επιστημόνων του εξωτερικού που όρισε η ΓΓΕΤ (Πρόεδρος ο P. J. Knowles, καθηγητής στο Πανεπιστήμιο του Cardiff). Αναλύονται ενδελεχώς τα ποιοτικά και ποσοτικά αποτελέσματα κάθε δραστηριότητας και οι μελλοντικές προοπτικές τους, αλλά και ο τρόπος διοίκησης του Ινστιτούτου. Η επιτροπή χαρακτηρίζει το Ινστιτούτο ως «πολύ καλό», με αναφορά τα διεθνή πρότυπα ομολόγων φορέων. Το ΙΘΦΧ εντάσσεται και πάλι στην «Αριστεία σε Ερευνητικά Ινστιτούτα ΓΓΕΤ».

Από τα τέλη του 2007, ο Δημήτρης Παλλές (EMΠ) και ο Νεκτάριος Λαθιωτάκης (FU Berlin) έχουν προσληφθεί για να ενισχύσουν τις δράσεις της φασματοσκοπίας και της υπολογιστικής χημείας, αντίστοιχα.

Οι ερευνητικές κατευθύνσεις του Ινστιτούτου, γύρω από τις οποίες έχουν αναπτυχθεί οι συνέργειες που αναφέρθηκαν παραπάνω, έχουν πλέον διαρθρωθεί ως εξής:

- Υπολογιστική Χημεία & Θεωρητική Μοριακή Φυσική
- Ατομική & Μοριακή Φυσική
- Θεωρία της Συμπυκνωμένης Ύλης
- Σύνθεση και Φυσιχοχημεία Υλικών
- Τεχνικές & Εφαρμογές Laser
- Φωτονική για Νανοεφαρμογές

### Σύνοψη - προοπτικές

Το ΙΘΦΧ επεκτάθηκε σε νέους τομείς έρευνας, με φροντίδα για την παράλληλη στελέχωσή τους με νέο ερευνητικό δυναμικό και τη δημιουργία απαραίτητων υποδομών. Η έμφαση δόθηκε έγκαιρα σε νέα νανοδομημένα υλικά με προηγμένη λειτουργικότητα (δυσσταδικά συμπολυμερή, ανόργανα-οργανικά υβριδικά υλικά, υλικά νανοσωματιδίων άνθρακα) και στη φωτονική και τις εφαρμογές της. Οι νέοι αυτοί τομείς προσέφεραν γόνιμο έδαφος για την ανάπτυξη δυναμικής συνεργείας μεταξύ πειραματικών και θεωρητικών δραστηριοτήτων του Ινστιτούτου.

Κομβικό επίτευγμα υπήρξε η δημιουργία παράδοσης για την επιτυχή διεκδίκηση ανταγωνιστικών έργων εξωτερικής χρηματοδότησης. Μέσω αυτής, το Ινστιτούτο εξασφάλισε απαραίτητους πόρους για τις αναπτυξιακές του δαπάνες σε πειραματικές και υπολογιστικές υποδομές, αλλά και για την εκπαίδευση σημαντικά αυξημένου αριθμού μεταπτυχιακών και μεταδιδακτορικών συνεργατών. Οι αυξημένοι πόροι του Ινστιτούτου επιτρέπουν τον μεσομακροπρόθεσμο σχεδιασμό της έρευνας.

Η παρουσία του Ινστιτούτου στον επιστημονικό χώρο είναι δυναμική, εστιασμένη σε θέματα μετωπικού ενδιαφέροντος, με αυξανόμενο ρυθμό δημοσιεύσεων και ανάπτυξη παραγωγικών δικτύων και συνεργασιών με ακαδημαϊκούς και βιομηχανικούς φορείς της χώρας και του εξωτερικού. Η εικόνα αυτή αποτυπώνεται και στην ανάδειξή του σε κέντρο «Αριστείας» μετά τις τελευταίες δύο αξιολογήσεις από εξωτερικές επιτροπές της ΓΓΕΤ, καθώς και στην επιλογή του ως κέντρου υποδοχής «European Young Investigator Award» της European Science Foundation και των European Union Research Organizations Heads of Research Councils. Η αναγνώριση αυτή, στηρίζει την επιλογή-μονόδρομο: μια συνεχή τροχιά προόδου που περιλαμβάνει τη διεθνή διάσταση της ερευνητικής προσπάθειας και συμβάλλει στην εκπαίδευση νέων ερευνητών και στην τεχνολογική εξέλιξη της χώρας.