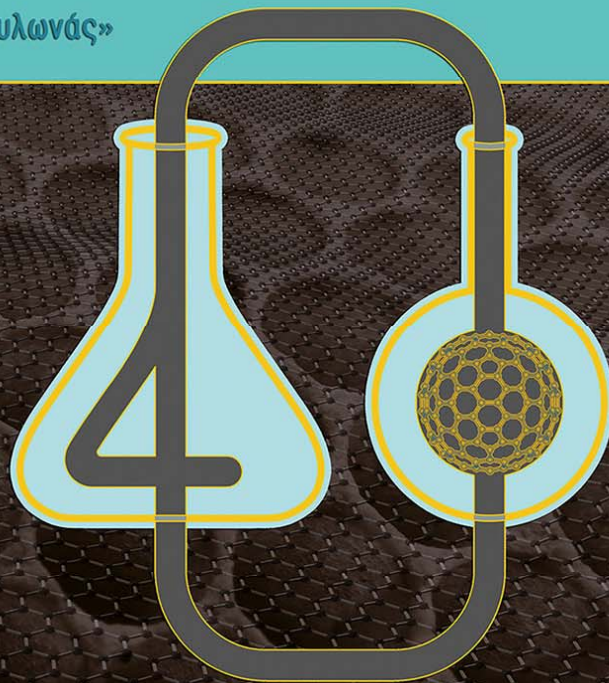


5^ο ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΕΙΑΣ

29-30 Σεπτεμβρίου 2017 • Αίθουσα Τελετών «Γεώργιος Μυλωνάς»



ΚΑΛΥΤΕΡΗ ΕΠΙΜΕΛΕΙΑ ΒΑΣΙΛ ΚΑΡΕΤΣΑ - ΕΚΔΟΣΗ ΤΥΠΟΓΡΑΦΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

40 ΧΡΟΝΙΑ
ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ

BIBLIO PERILHΨEΩN
BOOK OF ABSTRACTS

5^ο ΣΥΝΕΔΡΙΟ ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΕΙΑΣ
40 ΧΡΟΝΙΑ ΤΜΗΜΑ ΧΗΜΕΙΑΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

Αίθουσα Τελετών «Γεώργιος Μυλωνάς»

29 – 30 ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΥ 2017

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΣΥΝΕΔΡΙΟΥ	
Παρασκευή 29 Σεπτεμβρίου 2017	
1^η Ενότητα (Εναρξη)	
8:30–10:00	Εγγραφές Συνέδρων και Ανάρτηση Εργασιών
ΠΡΟΕΔΡΕΙΟ: Μ.Ε. Λέκκα, Α. Μιχαηλίδης, Δ. Πετράκης, Ι. Πλακατούρας, Μ. Σίσκος	
10:00–10:30	Χαιρετισμοί <ul style="list-style-type: none"> • Γ. Καψάλης, Πρύτανης του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων • Κ. Κοσμίδης, Κοσμήτορας της Σχολής Θετικών Επιστημών
10:30–11:10	Εναρκτήρια Ομιλία Μιλτιάδης Καραγιάννης ΜΑΓΕΙΑ, ΜΥΣΤΙΚΙΣΜΟΣ, ΜΕΤΑΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΕΠΙΣΤΗΜΗ, ΒΗΜΑΤΑ ΣΤΗΝ ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΤΗΣ ΧΗΜΕΙΑΣ ΑΠΟ ΤΟΥΣ ΑΡΧΑΙΟΥΣ ΧΡΟΝΟΥΣ ΜΕΧΡΙ ΤΙΣ ΑΡΧΕΣ ΤΟΥ 20ου ΑΙΩΝΑ
11:10–11:50	<i>Καφές – Ανηρτημένες Εργασίες</i>
2^η Ενότητα	
ΠΡΟΕΔΡΕΙΟ: Α. Γαρούφης, Ι. Πλακατούρας	
11:50–12:00	Θ. Χατζημητάκος, Α. Κασούνη, Α. Τρογκάνης, Κ. Σταλίκας ΑΝΙΧΝΕΥΣΗ ΕΞΑΣΘΕΝΟΥΣ ΧΡΩΜΙΟΥ, ΒΙΟΑΠΕΙΚΟΝΙΣΗ ΚΥΤΤΑΡΩΝ ΚΑΙ ΠΡΟΩΘΗΣΗ ΤΟΥ ΚΥΤΤΑΡΙΚΟΥ ΚΥΚΛΟΥ: ΤΡΕΙΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ ΤΕΛΕΙΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΥΨΗΛΗΣ ΚΒΑΝΤΙΚΗΣ ΑΠΟΔΟΣΗΣ, ΑΠΟ ΑΝΘΡΩΠΙΝΑ ΝΥΧΙΑ
12:00–12:10	Π. Κουβάτσης, Θ. Λαζαρίδης και Γ. Μαλανδρίνος ΦΩΤΑΥΓΗ ΠΟΛΥΠΥΡΙΔΙΝΙΚΑ ΣΥΜΠΛΟΚΑ ΤΩΝ Cu(I) ΚΑΙ Ir(III)
12:10–12:20	Φειδίας Μπαϊράμης, Ιωάννης Κωνσταντίνου, Τιβέριος Βαϊμάκης ΑΠΟΔΟΜΗΣΗ ΟΡΓΑΝΙΚΩΝ ΡΥΠΩΝ ΥΠΟ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑ ΗΛΙΑΚΟΥ ΦΩΤΟΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΝΑΝΟΪΝΩΝ TiO ₂ /g-C ₃ N ₄ ΠΟΥ ΣΥΝΤΕΘΗΚΑΝ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ELECTROSPINNING
12:20–12:30	Π. Υφαντή, Α. Μπατιστάτου, Ε. Λενέτη, Α. Τσαπίνου, Γ. Μάνος, Μ. Λέκκα ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΠΙΘΑΝΗΣ ΑΝΤΙΚΑΡΚΙΝΙΚΗΣ ΔΡΑΣΗΣ ΑΥΤΟΦΥΩΝ ΦΥΤΙΚΩΝ ΕΙΔΩΝ ΤΗΣ ΗΠΕΙΡΟΥ
12:30–12:40	Α. Πριμηκύρη, N. Sayyad, G. Quilici, E. Βρεττός, Κ. Lim, S.-W. Chi, G. Musco, Α. Τζάκος, Ι.Π. Γεροθανάσης ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΔΕΣΜΕΥΣΗΣ ΕΝΟΣ ΠΡΟΦΑΡΜΑΚΟΥ ΚΕΡΣΕΤΙΝΗΣ ΣΤΗΝ BCL-2 ΣΕ ΖΩΝΤΑ ΑΝΘΡΩΠΙΝΑ ΚΑΡΚΙΝΙΚΑ ΚΥΤΤΑΡΑ ΜΕ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ IN-CELL NMR
12:40–12:50	Κ. Μιλίου, L. Gergidis, C. Vlahos MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF BRUSHES FORMED BY DENDRITIC

2	I. Αγγελής, Κ. Ασημακίδου, Α. Κατσαούνη, Α. Στεφανίδου, Β. Τσίκαρης	ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΝΕΟΥ ΑΝΤΙΘΡΟΜΒΩΤΙΚΟΥ ΠΑΡΑΓΟΝΤΑ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΝΑΣΤΟΛΗ ΤΗΣ ΔΡΑΣΗΣ ΤΗΣ ΠΡΩΤΕΪΝΗΣ ΠΟΛΥΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ MRP4 ΣΤΑ ΑΝΘΡΩΠΙΝΑ ΑΙΜΟΠΕΤΑΛΙΑ	Ο
3	Constantinos G. Tsiafoulis, I. P. Gerotheranassis	Development of selective 1D TOCSY NMR spin chromatography analytical methods	Ο
4	Ε. Βρέττος, Ν. Sayyad, Θ. Καραμπέλας, Α. Κουγιουμτζή, Θ. Φώτσης, Κ. Ταμβακόπουλος, Α. Τζάκος	ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ, ΣΥΝΘΕΣΗ ΚΑΙ ΒΙΟΛΟΓΙΚΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΒΙΟΣΥΖΕΥΓΜΑΤΩΝ ΓΕΜΣΙΤΑΒΙΝΗΣ-GnRH ΜΕΣΩ ΔΕΣΜΟΥ ΟΞΙΜΗΣ ΓΙΑ ΕΚΛΕΚΤΙΚΗ ΣΤΟΧΕΥΣΗ ΚΑΡΚΙΝΙΚΩΝ ΚΥΤΤΑΡΩΝ	Ο
5	Ν. Ντέμου, Α. Μπρέντας, Π. Βούλγαρη, Μ. Αλαγιάννης, Β. Πολυχρονίδου, Β. Θεοδώρου, Κ. Σκομπρίδης	ΣΥΓΧΡΟΝΗ ΘΕΡΑΠΕΥΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ: ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΕΚΛΕΚΤΙΚΩΝ ΑΝΑΣΤΟΛΕΩΝ ΠΡΩΤΕΪΝΙΚΩΝ ΚΙΝΑΣΩΝ ΓΙΑ ΤΗ ΘΕΡΑΠΕΙΑ ΝΕΟΠΛΑΣΙΩΝ -ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΝΕΑΣ ΣΥΝΘΕΤΙΚΗΣ ΠΟΡΕΙΑΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΕΠΙΛΕΚΤΙΚΗ ΧΗΜΙΚΗ ΤΡΟΠΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΝΙΛΟΤΙΝΙΒΗΣ (ΝΙΛΟΤΙΝΙΒ)	Ο
6	Ε. Αλεξανδρή, Α. Πριμηκύρη, Α. Τζάκος, Ι. Γεροθανάσης	NMR ΧΑΡΤΟΓΡΑΦΗΣΗ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΝ ΚΑΙ ΕΚΛΕΚΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΔΕΣΜΕΥΣΗΣ ΛΙΠΑΡΩΝ ΟΞΕΩΝ ΜΕ ΤΗΝ ΑΛΒΟΥΜΙΝΗ ΤΟΥ ΠΛΑΣΜΑΤΟΣ ΣΕ ΑΤΟΜΙΚΟ ΕΠΙΠΕΔΟ	Ο
7	Νικόλαος Γ. Λάμπογλου, Αντώνιος Κ. Ζαρκάδης, Παναγιώτης Γκριτζάπης Μιχαήλ Γ. Σίσκος	Η ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΦΩΤΟΛΥΣΗΣ ΠΥΡΙΤΙΚΩΝ ΠΑΡΑΓΩΓΩΝ ΤΟΥ ΜΕΘΥΛΟΝΑΦΘΑΛΕΝΙΟΥ	Ο
8	Α. Πριμηκύρη, Ν. Sayyad, G. Quilici, Ε. Βρεττός, Κ. Lim, S.-W. Chi, G. Musco, Α. Τζάκος, Ι.Π. Γεροθανάσης	ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΔΕΣΜΕΥΣΗΣ ΕΝΟΣ ΠΡΟΦΑΡΜΑΚΟΥ ΚΕΡΣΕΤΙΝΗΣ ΣΤΗΝ BCL-2 ΣΕ ΖΩΝΤΑ ΑΝΘΡΩΠΙΝΑ ΚΑΡΚΙΝΙΚΑ ΚΥΤΤΑΡΑ ΜΕ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ IN-CELL NMR	Ο
9	Α. Τσιαιλάνης, Χ. Χατζηγιάννης, Α. Κωσταγιάννη, Α. Renziehausen, Μ. Yilmaz, Ν. Syed, Α.Γ. Τζάκος	Ενίσχυση της σταθερότητας και βιοδραστικότητας της τεμοζολομίδης στο πολύμορφο γλοιοβλάστωμα μέσω ενθυλάκωσης σε υπερμοριακό υποδοχέα.	Ο
10	Δημήτρης Διαμαντής, Αντώνης Τσιαιλάνης, Souad Adriouach, Andrej Babic, Ανδρέας Γ. Τζάκος	Ορθολογικός σχεδιασμός προφαρμάκων με βάση τα φλαβονοειδή τα οποία ενεργοποιούνται στο μικροπεριβάλλον των καρκινικών κυττάρων	Ο
11	I. Αγγελής, Κ. Ασημακίδου, Α. Κατσαούνη, Α. Στεφανίδου, Β. Τσίκαρης	ΕΝΔΟΚΥΤΤΑΡΙΑ ΣΤΟΧΕΥΣΗ ΤΗΣ ΠΡΩΤΕΪΝΗΣ ΠΟΛΥΦΑΡΜΑΚΕΥΤΙΚΗΣ ΑΝΤΙΣΤΑΣΗΣ MRP4 ΩΣ ΠΑΡΑΓΟΝΤΑ ΕΝΕΡΓΟΠΟΙΗΣΗΣ ΚΑΙ ΣΥΣΣΩΡΕΥΣΗΣ ΤΩΝ ΑΝΘΡΩΠΙΝΩΝ ΑΙΜΟΠΕΤΑΛΙΩΝ	Π
12	Αουάντ Α., Γκάλπινος Β., Δεμερτζής Α., Καλδέλη-Κέρου Α., Κριμίζη Π., Βαρβούνης Γ.	ΑΠΡΟΒΛΕΠΤΟΣ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΣ 2-[1-(ΥΠΟΚΑΤΕΣΤΗΜΕΝΩΝ ΜΕΘΥΛΟ)-1H-ΠΥΡΡΟΛΟ-2-ΚΑΡΒΟΞΑΜΙΔΟ]ΒΕΝΖΟΙΚΩΝ ΜΕΘΥΛΕΣΤΕΡΩΝ ΚΑΙ 2-{2-[(4-ΧΛΩΡΟΦΑΙΝΥΛΟ)-ΚΑΡΒΑΜΟΥΛΟ]-1H-ΠΥΡΡΟΛ-1-ΥΛΟ}ΟΞΙΚΟΥ ΜΕΘΥΛΕΣΤΕΡΑ	Π
13	Παναγιώτης Μακρής, Σωκράτης Αναστασόπουλος, Αντώνιος Κ. Ζαρκάδης και Παναγιώτης Βαρράς	Φωτοχημεία του Τολουολίου και του Αιθυλοβενζολίου: Μια CASSCF/CASPT2 υπολογιστική μελέτη	Π
14	Α. Κωσταγιάννη, Α. Τσιαιλάνης, Ε. Γιαννοπούλου, Σ. Παπάς, Κ. Σιάτης, Α. Λαμπροπούλου, Μ. Σακκά, Α. Κουγιουμτζή, Ε. Μπριασούλης, Χ. Καλόφωνος, Α. Τζάκος	Σύνθεση ενός κυτταρικού διεισδυτικού πεπτιδίου για στοχευμένη αντικαρκινική θεραπεία	Π

ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΔΕΣΜΕΥΣΗΣ ΕΝΟΣ ΠΡΟΦΑΡΜΑΚΟΥ ΚΕΡΣΕΤΙΝΗΣ ΣΤΗΝ BCL-2 ΣΕ ΖΩΝΤΑ ΑΝΘΡΩΠΙΝΑ ΚΑΡΚΙΝΙΚΑ ΚΥΤΤΑΡΑ ΜΕ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ IN-CELL NMR

**A. Πριμηκύρη^{1,*}, N. Sayyad¹, G. Quilici², E. Βρεττός¹, K. Lim³, S.-W. Chi³, G. Musco², A. Τζάκος^{1,*},
Ι.Π. Γεροθανάσης¹**

¹Τμήμα Χημείας, Τομέας Οργανικής Χημείας και Βιοχημείας, ΠΙ, Τ.Θ. 472, 54124, Ιωάννινα, Ελλάδα

²Biomolecular NMR Laboratory Genetics and Cell Biology S. Raffaele Scientific Institute via Olgettina 58, 20132 Milano Italy

³Disease Target Structure Research Center, KRIBB, Daejeon 34141, Republic of Korea

(*aleprimik@gmail.com, *agtzakos@gmail.com)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μεθοδολογία in-cell NMR έχει εξελιχθεί σε ένα ισχυρό εργαλείο για τη μελέτη των αλληλεπιδράσεων μεταξύ πρωτεϊνών και πρωτεϊνών-υποκαταστατών σε ατομικό επίπεδο σε ζωντανά κύτταρα. Αυτή η μεθοδολογία έχει εφαρμοστεί με επιτυχία σε επισημασμένες πρωτεΐνες που υπερεκφράζονται σε βακτήρια, παρέχοντας πληροφορίες σχετικά με τις διαμορφωτικές αλλαγές και τη δυναμική^[1,2]. Πρόσφατα, οι μελέτες αυτές έχουν επεκταθεί σε ευκαρυωτικά κύτταρα που προσφέρουν νέες δυνατότητες για τη μελέτη πρωτεϊνών στο φυσικό τους κυτταρικό περιβάλλον^[3].

Στην εργασία αυτή, περιγράφεται, για πρώτη φορά, η άμεση αλληλεπίδραση μιας μη-επισημασμένης πρωτεΐνης με έναν υποκαταστάτη, ενδοκυτταρικά σε ζώντα και ανέθικτα ανθρώπινα καρκινικά κύτταρα. Χρησιμοποιήθηκαν οι μεθοδολογίες μεταφοράς κορεσμού STD (saturation transfer difference) και Tr-NOESY (transfer NOESY) in-cell NMR για τη μελέτη της πρόσδεσης της 3' κερσετίνης-αλανίνης, ενός υδατοδιαλυτού συνθετικού αναλόγου της κερσετίνης, στην πρωτεΐνη Bcl-2 *in vivo* σε ζωντανά ανθρώπινα κύτταρα, τα οποία υπερεκφράζουν την Bcl-2. Η κερσετίνη, δεσμεύεται άμεσα με τον τομέα BH3 των πρωτεϊνών Bcl-2 *in vitro* προάγοντας την απόπτωση των καρκινικών κυττάρων, όπως έχει αναφερθεί στη διεθνή βιβλιογραφία^[4]. Η προσθήκη ενός επιλεκτικού αναστολέα της Bcl-2, ο οποίος ανταγωνίζεται για την ίδια περιοχή BH3,- έχει ως αποτέλεσμα την ελάττωση των απορροφήσεων NMR ¹H της 3' κερσετίνης-αλανίνης στην Bcl-2 υποδεικνύοντας την άμεση ανταγωνιστική δράση τους *in vivo*. Η μεθοδολογία in-cell NMR αποδεικνύεται μια πολλά υποσχόμενη στρατηγική για τη μελέτη της άμεσης πρόσδεσης ενός μικρού μορίου σε έναν ενδοκυττάριο μη επισημασμένο υποδοχέα σε ζώντα ανθρώπινα καρκινικά κύτταρα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Luchinat E, Banci L. (2016) *J. Biol. Chem.*, 291:3776–3784.
- [2] Theillet FX, Binolfi A, Frembgen-Kesner T, Hingorani K, Sarkar M, Kyne C, Li C, Crowley PB, Gierasch L, Pielak GJ, Elcock AH, Gershenson A, Selenko P. (2014) *Chem. Rev.*, 114:6661–6714.
- [3] Barbieri L, Luchinat E, Banci L. (2016) *Nat. Protoc.*, 11:1101–1111.
- [4] Primikyri A, Chatziathanasiadou MV, Karali E, Kostaras E, Mantzaris MD, Hatzimichael E, Shin JS, Chi SW, Briasoulis E, Kolettas E, Gerothanassis IP, Tzakos AG. (2014) *ACS Chem. Biol.*, 9:2737–2741.

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

«Η μεταδιδακτορική έρευνα υλοποιήθηκε με υποτροφία του ΙΚΥ η οποία χρηματοδοτήθηκε από την Πράξη «Ενίσχυση Μεταδιδακτόρων Ερευνητών/Ερευνητριών» από τους πόρους του ΕΠ «Ανάπτυξη Ανθρώπινου Δυναμικού, Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση» με άξονες προτεραιότητας 6,8,9 και συγχρηματοδοτείται από το Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο – ΕΚΤ και το ελληνικό δημόσιο».

Μπέλλου	Σ.	167
Μπλέτσα	Ε.	79
Μπόκαρης	Ε.Π.	104
Μπότη	Β.	39, 40, 54, 55
Μπούρα– Θεοδώρου,	Α.	131
Μπρέντας	Α.	143
Μπριασούλης	Ε.	158
Νάννου	Χ.	54, 55
Νενασέβα	Χ.	217
Ντέμου	Ν.	143
Ντόβα	Δ.Θ.	94
Ντουβάλη	Α.	68
Παλιούρας	Χ.	203
Παναγιώτου	Γ.	117
Πάνου-Πομώνη	Ε.	131
Πανταζή	Γ.	175
Παπαγεωργίου	Γ.	109
Παπαγιάννης	Δ.	197, 199
Παπαευσταθίου	Γ.	72
Παπαζώη	Ε.	72
Παπαϊωάννου	Δ.	65
Παπαμώκος	Γ.	29
Παπανικολάου	Μ.	65
Παπανικολάου	Ε.	80
Παπαπέτρος	Σπ.	206
Παπάς	Σ.	158, 160
Παπαχριστοδούλου	Χ.	96
Παρηγορίδη	Ι.-Ε.	205
Πασσάδης	Σ.	84
Παύλου	Α.	165
Πέγκα	Σ.	177
ΠΕΡΙΣΤΕΡΑΣ	Λ.Δ.	179
Πετεινέλη	Κ.	131
Πετράκης	Δ.	53, 106
Πλακατούρας	Ι.	74, 89
Πολυχρόνης	Ν.	98
Πολυχρονίδου	Β.	143
Πομώνης	Φ.	106
Πότση	Γ.	90
Πουλοπούλου	Ν.	109
Πουρνάρα	Α.	81, 87
Πριμηκύρη	Α.	145, 148
Ράπτη	Σ.	72, 74
Ρηγανάκος	Κ.Α.	211
Ρούσσης	Ι.	203, 213, 215, 217
Σάββας	Δ.	124