

## Συνέντευξη του Δρ. Εμμανουήλ Κλώντζα, Ερευνητή Γ, ΙΟΦΧ/ΕΙΕ

22.01.2020



**Κύριε Κλώντζα, ανήκετε στον Τομέα Μοριακής Φυσικής & Υπολογιστικής Χημείας του ΙΟΦΧ/ΕΙΕ ως Ερευνητής Γ'. Θα θέλαμε να μας μιλήσετε για τον τομέα αυτόν. Ποιες είναι οι κυριότερες δραστηριότητές του;**

Ο τομέας Μοριακής Φυσικής και Υπολογιστικής Χημείας του ΙΟΦΧ/ΕΙΕ αποτελεί έναν από τους πιο δυναμικούς τομείς του Ινστιτούτου και δραστηριοποιείται στον χώρο της μελέτης με θεωρητικές και υπολογιστικές τεχνικές των φυσικών και χημικών ιδιοτήτων ατόμων, μορίων και υλικών. Αυτό επιτυγχάνεται με την εκτεταμένη χρήση υπολογιστών και υψηλής ποιότητας λογισμικού που συνδυάζει γνώσεις από διαφορετικά αντικείμενα όπως τη φυσική, τη θεωρητική χημεία, την πληροφορική και τα μαθηματικά. Η πρόοδος του τομέα είναι άμεσα συνυφασμένη τόσο με την εξέλιξη των υπολογιστών όσο και του αντίστοιχου λογισμικού. Πλέον, υπάρχει η δυνατότητα να μελετήσουμε συστήματα που αποτελούνται από μερικές δεκάδες μέχρι εκατομμύρια άτομα, ανάλογα με τις υπολογιστικές μεθόδους που πρόκειται να χρησιμοποιηθούν. Ανάλογα με το πρόβλημα με το οποίο καλούμαστε να ασχοληθούμε κάθε φορά,

θα πρέπει να επιλέξουμε και την αντίστοιχη υπολογιστική μέθοδο η οποία θα μας δώσει αποτελέσματα ικανοποιητικής ακρίβειας σε ένα εύλογο χρονικό διάστημα. Η επιλογή εξαρτάται επίσης από το μέγεθος του συστήματος και από τον χρόνο εξέλιξης του φαινομένου που θέλουμε να μελετήσουμε. Πολλές φορές απαιτείται η χρήση περισσότερων της μιας μεθόδων για να μπορέσουμε να έχουμε την καλύτερη εικόνα για το χημικό σύστημα που μελετάμε. Στις μεθόδους αυτές περιλαμβάνονται υπολογισμοί της ηλεκτρονικής δομής της ύλης, τεχνικές μοριακής μηχανικής/δυναμικής και τελευταία γίνεται και χρήση τεχνικών μηχανικής μάθησης.

**Μιλήστε μας λίγο για τους τομείς εφαρμογής ή την παροχή υπηρεσιών που προκύπτουν από την αναπτυσσόμενη τεχνολογία του συγκεκριμένου τομέα.**

Η έρευνα που διεξάγεται στον τομέα εξυπηρετεί τη βαθύτερη κατανόηση των μηχανισμών των φαινομένων που παρατηρούνται σε ένα υπό μελέτη σύστημα και παρέχει τη δυνατότητα πρόβλεψης ενός μεγάλου φάσματος ιδιοτήτων μορίων και υλικών με μεγάλη ακρίβεια. Οι υπολογιστικές μέθοδοι πολλές φορές βοηθούν στην ερμηνεία αποτελεσμάτων που προκύπτουν από κάποια πειραματική διαδικασία. Άλλες φορές προβλέπουν ιδιότητες που θα ήταν δύσκολο να μετρηθούν πειραματικά. Σημαντική δουλειά γίνεται στη διερεύνηση των διεγερμένων καταστάσεων μορίων και υλικών. Εξίσου σημαντική δουλειά επιτυγχάνεται στο φασματοσκοπικό χαρακτηρισμό τόσο οργανικών όσο και ανόργανων χημικών συστημάτων. Άλλοι τομείς εφαρμογής είναι η μελέτη μηχανισμών χημικών αντιδράσεων και η προσρόφηση χημικών ουσιών πάνω σε επιφάνειες και πορώδη υλικά.

**Ποιες θα λέγατε ότι είναι οι προκλήσεις/δυσκολίες που αντιμετωπίζει σήμερα ένας ερευνητής;**

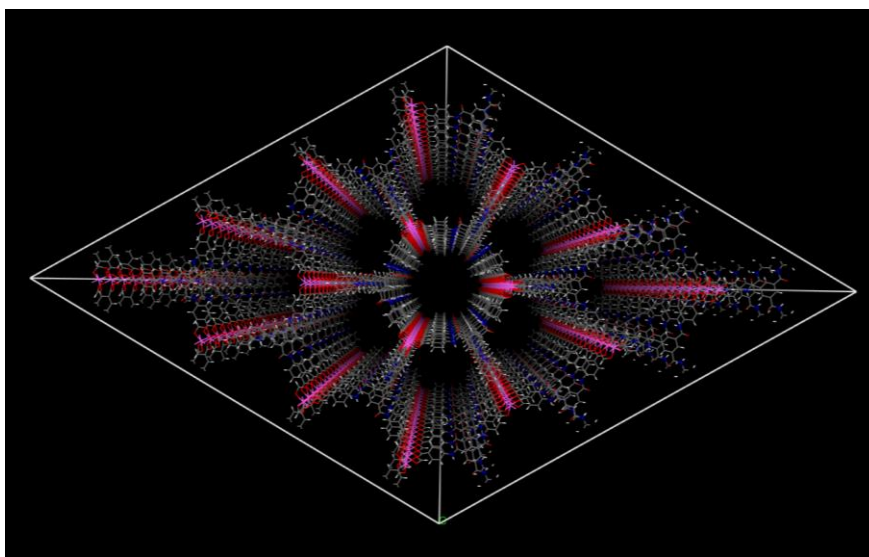
Οι προκλήσεις που αντιμετωπίζει σήμερα ένας ερευνητής είναι πολλές, ανήκουν σε διαφορετικά επίπεδα και απαιτείται μεγάλη προσπάθεια για να μπορέσει να τις αντιμετωπίσει. Η βασικότερη πρόκληση είναι ότι καλούμαστε να υπηρετήσουμε τις ανάγκες της κοινωνίας και να δώσουμε λύση στα προβλήματα που αντιμετωπίζει. Από εκεί και πέρα, η έρευνα που παράγουμε θα πρέπει να είναι ανταγωνιστική σε διεθνές επίπεδο και να έχει μεγάλη απήχηση στο αντίστοιχο πεδίο. Ειδικά σε πεδία αιχμής, ο ερευνητής στην Ελλάδα καλείται να τα «βάλει» με αντίστοιχες ομάδες σε όλο τον κόσμο, χωρίς ωστόσο να έχει τα ίδια εφόδια, να παράγει καινοτόμες ιδέες και να τις υλοποιεί ερευνητικά πολύ

γρήγορα. Στη συνέχεια, θα πρέπει να καταφέρει να προσελκύσει την κατάλληλη χρηματοδότηση για να πραγματοποιήσει την έρευνά του και να μπορέσει να δημιουργήσει την ερευνητική του ομάδα εξασφαλίζοντας, ταυτόχρονα, την υλικοτεχνική υποδομή και τα αναλώσιμα τα οποία χρειάζονται. Η έλλειψη προγραμματισμού στην προκήρυξη χρηματοδοτήσεων για ερευνητικά έργα συμβάλλει αρνητικά στον τομέα αυτό, αλλά σταδιακά φαίνεται η κατάσταση πως αλλάζει. Μια άλλη πρόκληση είναι η μετάδοση των γνώσεων και των αποτελεσμάτων του ερευνητικού έργου που πραγματοποιείται στην κοινωνία. Ενώ υπάρχουν συγκεκριμένοι δίαυλοι επικοινωνίας μέσω των οποίων γίνονται γνωστά τα αποτελέσματα του ερευνητικού έργου στην επιστημονική κοινότητα, π.χ. μέσω δημοσιεύσεων σε διεθνή περιοδικά και σε επιστημονικά συνέδρια, δεν υπάρχουν οι αντίστοιχοι δίαυλοι προς τους πολίτες και προς τους φοιτητές. Παρά τις αντιξοότητες που υπάρχουν, οι Έλληνες ερευνητές τα καταφέρνουν καλά, έχοντας να παρουσιάσουν σημαντικό δημοσιευμένο έργο, ελκύοντας σημαντικές χρηματοδοτήσεις από ανταγωνιστικά προγράμματα και συμβάλλοντας σημαντικά σε γνώση στα αντίστοιχα ερευνητικά πεδία όπου δραστηριοποιούνται.

### **Υπάρχει κάποιο πεδίο αιχμής στο οποίο εστιάζετε αυτήν την περίοδο; Ποιοι οι μελλοντικοί στόχοι σας αναφορικά με αυτό;**

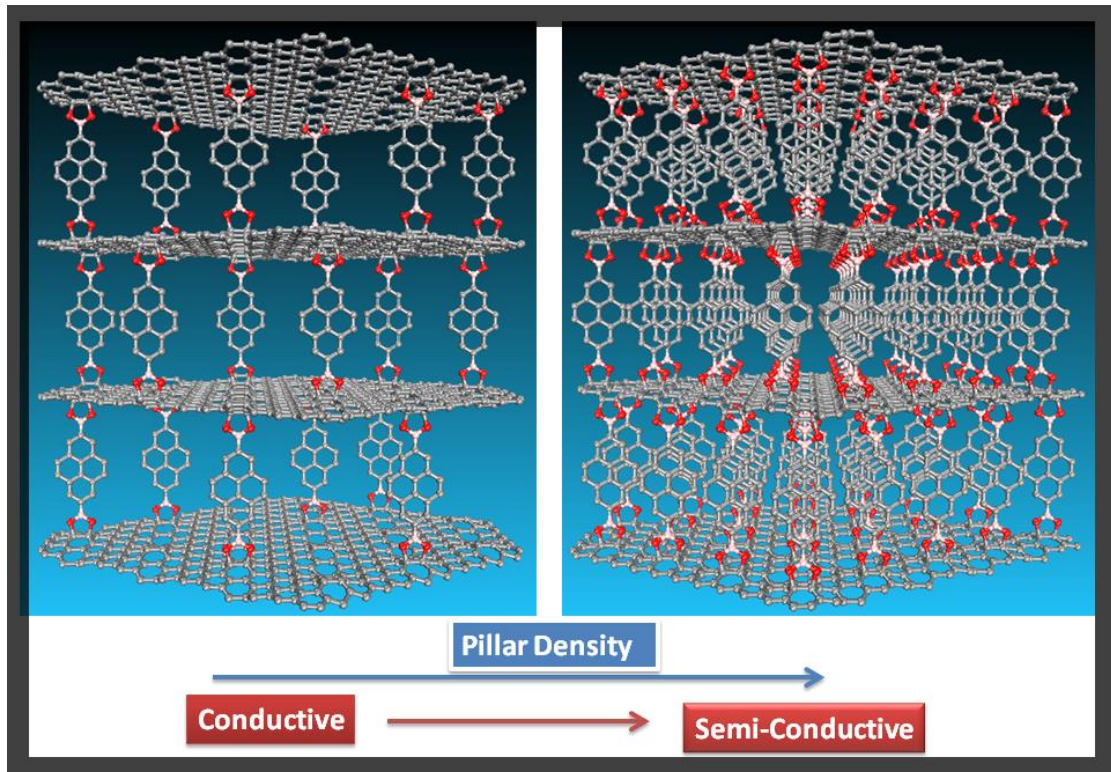
Τα ερευνητικά μου ενδιαφέροντα αυτή την περίοδο εστιάζουν κυρίως στον σχεδιασμό πορώδων υλικών για εφαρμογές που σχετίζονται με το περιβάλλον και την ενέργεια με τη χρήση μεθόδων υπολογιστικής χημείας. Τα πορώδη είναι στερεά υλικά τα οποία διαθέτουν ένα εκτεταμένο δίκτυο πόρων, όπως ένα σφουγγάρι, με ένα από τα πιο γνωστά παραδείγματα να είναι οι ζεόλιθοι και οι ενεργοί άνθρακες. Στις μελέτες μας, χρησιμοποιούμε τόσο παραδοσιακά πορώδη υλικά όσο και υλικά που ανήκουν σε νέες κατηγορίες και διαθέτουν μεγαλύτερες δυνατότητες, όπως τα μεταλλο-οργανικά σκελετικά υλικά των οικογενειών MOF (Metal-Organic Frameworks) και ZIF (Zeolite Imidazolate Frameworks). Για κάθε μια από τις εφαρμογές για τις οποίες σχεδιάζουμε πορώδη υλικά, θα πρέπει να πληρούνται και συγκεκριμένες προϋποθέσεις τις οποίες πρέπει να λαμβάνουμε υπόψη. Ένα μέρος της έρευνας που διεξάγουμε σχετίζεται με τις επιπτώσεις της κλιματικής αλλαγής και της μόλυνσης του περιβάλλοντος από τις ανθρώπινες δραστηριότητες, που λίγο πολύ είναι γνωστές. Εμείς προσπαθούμε να συμβάλλουμε στη μετρίαση των επιπτώσεών της και την αναστροφή της όλης κατάστασης σχεδιάζοντας υλικά τα οποία θα μπορούν επιλεκτικά να δεσμεύουν αέρια τα οποία συμβάλλουν στο φαινόμενο του θερμοκηπίου, ώστε να μην απελευθερώνονται στο περιβάλλον, όπως για παράδειγμα το διοξείδιο του άνθρακα ή το εξαφθοριούχο θείο. Τα νέα πορώδη υλικά που σχεδιάζουμε

κάνουν την όλη διαδικασία της δέσμευσης και αποθήκευσης τέτοιων αερίων αποδοτικότερη και ενεργειακά οικονομικότερη.



**Γραφική απεικόνιση μιας δομής MOF με μονοδιάστατα πορώδη κανάλια.**

Παράλληλα, με την παραπάνω ερευνητική δραστηριότητα, συμμετέχουμε και σε ένα ερευνητικό πρόγραμμα χρηματοδοτούμενο από το Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας και Καινοτομίας που αφορά τον σχεδιασμό νέων υποστυλωμένων δομών γραφενίου με ελεγχόμενες ηλεκτρονικές και μηχανικές ιδιότητες. Στο πρόγραμμα αυτό μελετάμε με χρήση υπολογιστικών τεχνικών πώς η μεταβολή της χημικής σύστασης και κάποιων δομικών χαρακτηριστικών των υποστυλωμένων γραφενίων μπορεί να επιφέρει αλλαγές στην ηλεκτρική συμπεριφορά αυτών των υλικών, μετατρέποντάς τα για παράδειγμα από αγωγούς σε ημιαγωγούς. Επιπλέον, μας ενδιαφέρει να μάθουμε πώς οι ηλεκτρικές τους ιδιότητες μεταβάλλονται, όταν σε αυτά ασκηθούν διαφόρων ειδών και κατευθύνσεων παραμορφώσεις.



**Μεταβολή των ηλεκτρικών ιδιοτήτων υποστυλωμένων υλικών με βάση το γραφένιο με μεταβολή της πυκνότητας πυλώνων.**

Επίσης, πρόσφατα έχουμε ξεκινήσει να δουλεύουμε σε θέματα σχετικά με τη δέσμευση υγρασίας από την ατμόσφαιρα και με την επιλεκτική δέσμευση οργανικών ρύπων από υδατικά διαλύματα. Στην πρώτη περίπτωση στοχεύουμε να σχεδιάσουμε πορώδη υλικά τα οποία θα είναι ικανά να δεσμεύουν σημαντικό ποσοστό υγρασίας από την ατμόσφαιρα σε περιοχές με έλλειψη νερού και στη συνέχεια να μπορούν να το αποδίδουν πίσω στην υγρή φάση. Η ικανότητα αυτών των υλικών στη δέσμευση νερού σχετίζεται άμεσα τόσο με τις ιδιότητες αυτών των υλικών όσο και με τις συνθήκες κάτω από τις οποίες θα κληθούν να αντεπεξέλθουν, όπως η σχετική υγρασία και θερμοκρασία κατά τη διάρκεια ενός 24ωρου και θα πρέπει η απόδοσή τους να βελτιστοποιηθεί κάτω από τις επικρατούσες συνθήκες. Στη δεύτερη περίπτωση, μελετάμε το πώς κάποια συγκεκριμένα υλικά της οικογένειας MOF μπορούν να χρησιμοποιηθούν στη δέσμευση οργανικών ρύπων που δεν διασπώνται εύκολα στη φύση από μόνοι τους και να παραμένουν για μεγάλο διάστημα σε υδατικά συστήματα. Τέτοιοι οργανικοί ρύποι για παράδειγμα είναι οι φαινόλες, διάφορα αντιβιοτικά, ακόμα και ουσίες που χρησιμοποιούνται στα αντηλιακά. Σκοπός μας είναι να τις δεσμεύσουμε μέσα σε πορώδη υλικά και στη συνέχεια να τις διασπάσουμε φωτοκαταλυτικά σε μικρότερες, λιγότερο επιβλαβείς, χημικές ενώσεις. Η σχετική έρευνα πρόκειται να χρηματοδοτηθεί από το Ίδρυμα Κρατικών Υποτροφιών μέσω της δράσης μεταδιδακτόρων ερευνητών.