

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Μ. Βαλαβανίδης, Μεταπτυχιακός Σπουδαστής Τμήματος Χημικών Μηχανικών.

ΘΕΜΑ : Μακροσκοπική θεωρία διφασικής ροής σε πορώδη μέσα, μέσω διεργασιών μέσης τιμής φαινομένων πορώδους κλίμακας ροής.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τρίτη, 27 - 10 - 92

ΩΡΑ : 5.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Μετά το τέλος της δευτεροβάθμιας αμιγούς υδατοπλημμύρας ενός ταμιευτήρα πετρελαίου, το μεγαλύτερο μέρος (περίπου τα δύο τρίτα) της αρχικής ποσότητας πετρελαίου παραμένει στο πέτρωμα με μορφή παγιδευμένων γαγγλίων μικρού συνήθως όγκου (1 έως 15 πόρους). Σκοπός των τριτοβάθμιων μεθόδων εξόρυξης πετρελαίου είναι η κινητοποίηση ή / και διαλυτοποίηση των παγιδευμένων γαγγλίων και η απόληψη ενός σημαντικού μέρους του υπολοιπούμενου πετρελαίου με αποδεκτό κόστος. Όταν στον ταμιευτήρα έχουν επιτευχθεί συνθήκες τριτοβάθμιας αμιγούς απόληξης πετρελαίου, η δημιουργία και διατήρηση τράπεζας πετρελαίου εξαρτάται από το αποτέλεσμα του ανταγωνισμού των μηχανισμών διάσπασης και παγίδευσης των κινουμένων γαγγλίων αφενός και σύγκρουσης και συνένωσης των γαγγλίων αφετέρου. Η δυναμική συμπεριφορά πληθυσμού γαγγλίων έχει περιγραφεί από δύο ολοκληρωδιαφορικές εξισώσεις του τύπου δημιουργίας- καταστροφής (birth-death). Τα γάγγλια χαρακτηρίζονται από τον όγκο τους και από το αν είναι κινητοποιημένα ή παγιδευμένα. Οι εξισώσεις αυτές διακριτοποιήθηκαν και επιλύθηκαν για συνθήκες σταθερής και πλήρως ανεπτυγμένης ροής. Γνωρίζοντας τις κατανομές κινητοποιημένων και παγιδευμένων γαγγλίων μπορούμε να υπολογίσουμε μακροσκοπικές ιδιότητες της υδατοπλημμύρας, όπως το λόγο σχετικών διαπερατοτήτων και την παροχή πετρελαίου. Απότερος σκοπός μας είναι ο καθορισμός των συνθηκών που ευνοούν τη δημιουργία και διατήρηση τράπεζας πετρελαίου.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. A. Frennet, Universite libre de Bruxelles

ΘΕΜΑ : A new Method for the determination of the Hydrogen Monolayer Content on Metal supported Catalysts based on Thermodynamic Criteria applied to the EuroPt1 reference Catalyst.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Παρασκευή, 16 - 10 - 1992

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Hydrogen chemisorption plays a very important role in the characterization of metal catalysts. The value of the monolayer content (n_m) is widely used to determine the dispersion of a supported metal, in spite of the variations of the stoichiometry of hydrogen chemisorption at high dispersion. The active surface area used as a reference to calculate the TOF is also associated with the monolayer content.

In the first part of this communication it is analyzed how the most often used methods (extrapolation to zero pressure, determination of the so called "irreversible hydrogen",...) are depending not only on the thermodynamics of adsorption but are also dependent on experimental features like the size of the catalyst sample, the evacuation rate at the catalyst level, the working pressure range,...

In order to determine a value of n_m independently of these experimental features, we have already proposed the following procedure: introduce hydrogen at high temperature (200 or 300°C), cool to 77K; measure the adsorption isotherm at 77K in the desorption mode (static or dynamic). In the pressure range below 10^{-1} Tor, the isotherm becomes completely flat. Our proposal was to consider that the corresponding adsorbed amount is a measure of the n_m .

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Θανάσης Σαμπάνης, Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τεχνολογικό
Ινστιτούτο Γεωργίας, Ατλάντα, Γεωργία, Η.Π.Α.

ΘΕΜΑ : Παραγωγή Πρωτεϊνών και Κατασκευή Τεχνητών Οργάνων με
Κύτταρα Θηλαστικών: Εφαρμογές Κυττάρων Ενδοκρινών
Αδένων.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων, Τ.Χ.Μ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τρίτη 15 Σεπτεμβρίου 1992

ΩΡΑ : 4.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Μετά από μια σύντομη επισκόπηση της παρασκευής φαρμακευτικών πρωτεϊνών και τεχνητών οργάνων, η παρουσίαση αυτή θα επικεντρωθεί στις εφαρμογές κυττάρων ενδοκρινών αδένων, κυρίως της υποφύσεως και του παγκρέατος. Η ρυθμιζόμενη έκκριση ορμονών και πρωτεϊνών των ενδοκρινών κυττάρων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον σχεδιασμό διεργασιών όπου η κυτταρική καλλιέργεια διεξάγεται κατά τέτοιο τρόπο ώστε να διευκολύνεται ο καθαρισμός του προϊόντος στα επόμενα στάδια διαχωρισμού. Ενδοκρινή κύτταρα μπορούν επίσης να ακινητοποιηθούν σε βιοσυμβατά πολυμερή και να εμβολιασθούν για μακροχρόνιο έλεγχο ασθενειών, όπως ο διαβήτης. Το πολυμερές είναι περατό από θρεπτικές ουσίες μικρού μοριακού βάρους και ινσουλίνη, όχι όμως από αντισώματα ή T λυμφοκύτταρα, με αποτέλεσμα το ανοσοποιητικό σύστημα του ασθενούς να μην μπορεί να προσβάλει τα εμβολιασμένα ενδοκρινή κύτταρα. Τα πειράματά μας διεξάγονται με γενετικά μετασχηματισμένα κύτταρα παγκρέατος BTC3 και υποφύσεως AtT-20 από ποντίκια τα οποία εκκρίνουν ινσουλίνη ή αυξητική ορμόνη. Τα κύτταρα μπορούν να εκκρίνουν ορμόνη σε πολλαπλά επεισόδια διεγέρσεως με ενδιάμεσες περιόδους "επαναφορτίσεως" AtT-20 κύτταρα που έχουν καλλιεργηθεί σαν σφαιροειδή συσσωματώματα μπορούν να ακινητοποιηθούν σε πολυμερή αλγινικού ασβεστίου/πολυλυσίνης/αλγινικού ασβεστίου χωρίς σημαντικές αρνητικές επιπτώσεις στις μεταβολικές και εκκριτικές ιδιότητές τους. Τα κύτταρα στα ακινητοποιημένα σφαιροειδή δεν πολλαπλασιάζονται, μεταβολίζουν όμως και εκκρίνουν σε σταθερούς ρυθμούς για περιόδους τουλάχιστον 40 ημερών. Το γεγονός ότι η παρασκευή παραμένει ουσιαστικά αναλλοίωτη για μακρές περιόδους είναι ιδιαίτερα σημαντικό για την κατασκευή τεχνητών οργάνων από γενετικά μετασχηματισμένα ενδοκρινή κύτταρα.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Φαλάρας Πολύκαρπος, Συνεργαζόμενος Ερευνητής στο
Ινστιτούτο Φυσικοχημείας του ΕΚΕΦΕ "ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ"

ΘΕΜΑ : Φαινόμενα ιονανταλλαγής και υποστύλωσης σε φυλλόμορφες
αργίλους. Εφαρμογές σε θέματα κατάλυσης και
ηλεκτροκατάλυσης.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΓΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα 14 - 9 - 92

ΩΡΑ : 5 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Οι φυλλόμορφες άργιλοι είναι πολυμερή αργιλοπυριτικά
ορυκτά τα οποία συνδυάζουν ιδιότητες κατιονικής ανταλλαγής, ελαστικής
ένθεσης, διόγκωσης και προσρόφησης. Παρουσιάζουν καταλυτικές ιδιότητες και
χρησιμοποιούνται ως καταλύτες και ως υποστρώματα καταλυτών. Η υποστύλωση
τους με οξειδία μετάλλων μετάπτωσης (π.χ. V_2O_5 , MoO_3) αυξάνει σημαντικά
την καταλυτική τους δράση. Χαρακτηριστικά παραδείγματα αποτελούν η
κατάλυση της οξείδωσης του SO_2 καθώς και της οξείδωσης της μεθανόλης σε
φορμαλδεύδη. Από την άλλη μεριά, η απόθεση τους υπό μορφή λεπτού υμενίου
στην επιφάνεια ενός ηλεκτροδίου μεταβάλλει ριζικά τις ιδιότητες του
ηλεκτροδίου και ανοίγει πολλές δυνατότητες για εφαρμογές στην
ηλεκτροκατάλυση. Χαρακτηριστικά αναφέρονται: διεργασίες επιλεκτικές
σχήματος και μεγέθους, κατασκευή αισθητήρων (sensors) καθώς και αναλυτικές
εφαρμογές. Επιπλέον, τα μορφοποιημένα αυτά ηλεκτρόδια μπορούν να
χρησιμοποιηθούν στην ηλεκτροκαταλυτική καταστροφή ρυπαντών σε υγρά
απόβλητα καθώς και για την μελέτη της χημικής συμπεριφοράς της διεπιφάνειας
ανάμεσα σε μη αγώγιμα στερεά και σε διαλύματα.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. P. Rempp, Institute "Charles Sodron", Strasbourg France.

ΘΕΜΑ : Synthesis of tailor made polymers via anionic polymerization
processes.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Πέμπτη, 10 - 9 - 92

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : In the first part of this presentation the conditions of "livingness" will be discussed, as they determine the ability of anionic polymerizations to yield well defined polymer structures and narrow molecular weight distributions. The second part will be devoted to a review of various applications of anionic polymerizations in model polymer synthesis: ω -functional macromolecules including macromonomers cyclic macromolecules, end-linking reactions yielding model networks, block copolymers, grafting processes, and star polymer synthesis.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Evangelhos Zafiriou, Department of Chemical Engineering and Institute for System Research, University of Maryland at College Park.

ΘΕΜΑ : Optimal Operation and Control of Chemical Processes in the Presence of Modeling Error and Constraints.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 2 - 9 - 1992

ΩΡΑ : 4.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Rapidly changing market conditions have put increased emphasis on-line optimization as a means of extracting the most profit from existing capital investment. This has required the integration of the control and optimization aspects of the decision making process, which has resulted in the inclusion of plant economic objectives as objectives that have to be achieved by the on-line control system. Optimal process operating points usually lie at the intersection of constraints. Hence the need of designing control systems that are able to handle constraints on several process variables has become evident. Model Predictive Control (MPC) algorithms solve on-line, at every sampling point, an appropriate optimization problem, which may be subject to satisfying process constraints. These controllers utilize an explicit linear or nonlinear model of the process in the optimization. Experience has shown MPC to be an excellent technique for handling constraints. As tighter performance demands are placed on the control system, however, it has become evident that modeling error can result in serious stability problems. This is especially true in the presence of constraints, which result in a nonlinear closed-loop system, even when the plant dynamics can be assumed linear. This presentation describes the development of a theoretical framework for studying the robustness with respect to modeling error, of constrained MPC algorithms. This framework has allowed the direct extension of results from robust linear control theory to the constrained, and therefore nonlinear, case. Limitations imposed on constraint selection for multi-input multi-output processes by inherent process characteristics have also surfaced from this work. The use of nonlinear models is discussed in the context of semi-batch or batch processes. Partial repeated linearization can be used in the MPC algorithm to reduce on-line computational requirements. The MPC parameters can be tuned via interactive off-line multi-objective optimization.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Spyros N. Agathos, Department of Chemical Engineering,
Rutgers University.

ΘΕΜΑ : Νέοι Υβριδικοί Βιοαντιδραστήρες για Αποδοτική Παραγωγή
Φαρμακευτικών Προϊόντων.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τρίτη, 1 - 9 - 1992

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η βιολογική παραγωγή ωρισμένων χημικών ενώσεων συμπίπτει χρονικά με την εκθετική φάση ανάπτυξης του παραγωγού μικροοργανισμού. Συνεπώς, η χρονική προέκταση της εκθετικής φάσης ανάπτυξης είναι ένας ελκυστικός τρόπος αύξησης της τελικής συγκέντρωσης του προϊόντος. Εξ άλλου, η ακινητοποίηση κυττάρων μικροοργανισμών προσφέρει υψηλές ταχύτητες βιομετατροπής ανά μονάδα όγκου βιοαντιδραστήρα και στην περίπτωση νηματωδών μυκήτων, ευνοεί την νευτώνεια ρεολογία της υγρής φάσης. Ο συνδυασμός εκτεταμένης εκθετικής ανάπτυξης με την ακινητοποίηση κυττάρων μυκήτων υλοποιείται σε ένα νέο σύστημα βιοαντιδραστήρα IPRS για την παραγωγή φαρμακευτικών προϊόντων. Στην υψηλή παραγωγικότητα του συστήματος αυτού συμβάλλει σημαντικά όχι μόνον η ακινητοποιημένη βιομάζα εντός του βιοαντιδραστήρα, αλλά και το υγρό ρεύμα εκροής που εμπλουτίζεται σε εκθετικά αναπτυσσόμενα κύτταρα.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Professor Costas Grigoropoulos, Department of
Mechanical Engineering, University of California, Berkely,
CA 94720, USA.

ΘΕΜΑ : Heat Transfer in Laser Melting of Semiconductor Films.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 17 Ιουνίου 1992.

ΩΡΑ : 7 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Interactions of laser irradiation with matter may lead to controlled phase change transformations and material structure modifications. Melting and solidification of a silicon film by continuous wave laser beam irradiation has been studied. The silicon melting and recrystallization is controlled by the temperature distribution in the semiconductor. Numerical calculations have been carried out for a range of laser beam parameters and material translational speeds. The results for the melt pool size have been compared with experimental data. The temperature field development has also been monitored with localized reflectivity measurements. Experimental and predicted transient reflectivity distributions have been compared. The experiments confirm that the onset of melting occurs through a nonhomogeneous process.

During transient laser heating of thin silicon films at the nanosecond scale, the changes in the material complex refractive index with temperature modify the energy absorption, and thus the temperature field in the target material. The transient temperature field development during heating of amorphous silicon films on glass substrates is studied. Experimental optical transmission data are compared with heat transfer modeling results.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Αγγελος Ευσταθίου, Μεταδιδακτορικός Ερευνητής
ΕΙΧΗΜΥΘ.

ΘΕΜΑ : Εφαρμογή δυναμικών μεθόδων (Transient Methodos), με
ταυτόχρονη χρήση ισοτόπων, στη μελέτη της καταλυτικής
οξειδωσης μεθανίου σε ντοπαρισμένη Τιτάνια.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 25 - 5 - 1992

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η χρήση in situ δυναμικών μεθόδων στην ετερογενή
κατάλυση έχει αναγνωρισθεί σαν ένα πολύ σημαντικό εργαλείο για την
σωστή μελέτη τόσο του μηχανισμού της αντίδρασης όσο και για την
μέτρηση/ ταυτοποίηση ενδιάμεσων προϊόντων σε μεγάλες μετατροπές
αντίδρασης. Η χρήση τέτοιου είδους πληροφοριών οδηγεί αναμφίβολα σε ένα
σωστότερο σχεδιασμό καταλυτών για την βελτιστοποίηση του ρυθμού και της
παραγωγής της αντίδρασης.

Ο ρυθμός μιας καταλυτικής αντίδρασης είναι άμεσα συνδεδεμένος με τις
επιφανειακές καλύψεις των ενδιάμεσων προϊόντων τα οποία αληθινά
συμμετέχουν στην αντίδραση, όσο και με τις ειδικές ταχύτητες των
ενδιάμεσων ~~καδίων~~ καδίων τα οποία αποτελούν τον μηχανιστικό δρόμο που
ακολουθεί η αντίδραση. Αυτές ακριβώς οι ποσότητες μπορούν να μετρηθούν
με δυναμικές μεθόδους κάνοντας χρήση ισοτόπων χωρίς να επέλθει κάποια
διαταραχή στην ταχύτητα της καταλυτικής αντίδρασης.

Στην παρούσα μελέτη γίνεται χρήση διαφόρων ειδών δυναμικών μεθόδων
για την μελέτη της καταλυτικής μετατροπής μεθανίου σε ανώτερους
υδρογονάνθρακες παρουσία οξυγόνου πάνω σε καταλύτη ντοπαρισμένης
Τιτάνιας με κατιόντα Λιθίου (Li^+ -doped TiO_2). Εξετάζεται ειδικά ο ρόλος
του οξυγόνου της Τιτάνιας (επιφανειακού και αυτού που υπάρχει στο
κρυσταλλικό πλέγμα της TiO_2) στον ρυθμό και την εκλεκτικότητα της
αντίδρασης.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Ronald Imbihl
Fritz-Haber Institute of the Max-Planck Society, Berlin,
Germany

ΘΕΜΑ : Spatiotemporal, Pattern Formation in Oscillatory Surface
Reactions.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Πέμπτη, 21 - 5 - 1992

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Heterogeneous catalytic reactions on single crystals have been studied by Photoemission Electron Microscopy (PEEM) as a micron-scale spatially resolved technique. Very interesting spatiotemporal behavior in the form of pattern formation can be observed in connection to kinetic oscillations. As an example the catalytic reduction of NO with NH₃ on a Pt(100) surface, which exhibits kinetic oscillations under isothermal conditions in the 10⁻⁶ mbar pressure range, will be considered. Video-recorded real time surface imaging with PEEM under reaction conditions reveals a variety of fluctuating spatial patterns when the reaction rate oscillates macroscopically. Just outside the parameter region for oscillations one observes a chaotic spatiotemporal behavior associated with local oscillations which, however, are not synchronized to produce a macroscopic oscillatory behavior. These observations are discussed in connection to the catalytic reaction mechanism and the surface structural transformations which drive the oscillations.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof.C. Galotis, Dept. of Materials, Queen Mary & Westfield College, Mile End Road, London E1 4NS.

ΘΕΜΑ : The Application of Laser Raman Spectroscopy in the Characterisation of Polymers and Composites.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 18 - 5 - 1992

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The application of Laser Raman Spectroscopy (LRS) study of (a) polymers-with emphasis to polymer fibres- (b) polymer fibre/polymer matrix interfaces and (c) full polymer composites, will be reviewed.

Extensive LRS work on a series of high performance polymer and polymer derived fibres, has been undertaken. The relative intensities and bandwidths of the first, as well as, the second-order Raman spectra of these fibres have been related to variations in (a) modulus (b) diameter (c) surface treatment and (d) processing conditions. The molecular deformation of all these fibres has also been studied in detail by subjecting them to tensile or compressive stresses while monitoring their Raman response. Furthermore, the effect of temperature upon the Raman spectrum of these fibres has also been examined.

The dependence of Raman frequencies upon applied strain for each individual carbon fibre, as well as, for polymer fibres such as Kevlar, has been employed to map the strain in fibres embedded in polymer matrices.

LRS has also been employed to map the strain in fibres embedded in full composites. The current state-of-the-art will be reviewed in both cases and the validity of certain predictive analytical models will be discussed in light of the experimental data.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Thanasis Panagiotopoulos, School of Chemical Engineering,
Cornell University, USA.

ΘΕΜΑ : Monte Carlo simulations of phase equilibria and conformational
transitions in polymeric systems.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 18 Μαρτίου 1992

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Molecular-level simulations are rapidly developing into a major scientific tool, complementing theory and experiments in the quest for better understanding of the behavior of complex physical systems. For design of new materials with desired properties, the ability to predict the phase behavior and microstructure of a system from its molecular composition is crucial. This is a difficult problem for molecular simulations, because the time scale of phase transformations is many orders of magnitude longer than what can be handled with molecular dynamics simulations. In this seminar, we first introduce recently developed Monte Carlo techniques for the calculation of free energies and phase equilibria of simple fluids and polymers. We also discuss Monte-Carlo based methodologies for determining conformational transitions. We apply these techniques to (a) determine the chain length and density dependence of the chemical potential for continuous and lattice models of homopolymers (b) examine the phase behavior and microstructure for a micelle-forming model for non-ionic surfactants and (c) analyze the collapse/coil conformational transition for simple model homopolymers and proteins. Comparisons of simulation results to experimental data are generally favorable. We conclude by discussing the limitations of current molecular simulation techniques, as well as potential future extensions and applications to more realistic systems.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ :Θανάσης Κωνσταντόπουλος, High Temperature Chemical
Reaction Engineering Laboratory, Yale University,
(ΗΠΑ).

ΘΕΜΑ :Πρόσφατες Εξελίξεις στη Μεταφορά Αερολυμάτων και
στη Δυναμική Ανάπτυξης Εναποθέσεων.

ΤΟΠΟΣ :Αίθουσα Σεμιναρίων Τμήματος Χημικών Μηχανικών.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ :Δευτέρα, 10 - 2 - 1992

ΩΡΑ :7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ :Αναλύεται το πρόβλημα κατανόησης και πρόβλεψης της μεταφοράς σωματιδίων αερολυμάτων σε επιφάνειες, καθώς επίσης της δομής και ιδιοτήτων των σωματιδιακών εναποθέσεων που προκύπτουν. Αυτά τα θέματα βρίσκουν εφαρμογή σε μια ποικιλία τεχνολογικών περιοχών, όπως fouling συσκευών εγκαταστάσεων παραγωγής ενέργειας (επιφάνειες εναλλακτών θερμότητας, πτερύγια στροβίλων), καθαρισμός καυσαερίων και σύνθεση υλικών χρησιμοποιώντας διεργασίες αερολυμάτων (οπτικές ίνες, λεπτά φιλμ και επικαλύψεις, κεραμικές κόνιες). Οι ρυθμοί μεταφοράς των σωματιδίων μπορούν να υπολογιστούν λύνοντας εξισώσεις διαφορικών ισοζυγίων, θεωρώντας το σωματιδιακό αερόλυμα σαν ένα συνεχές μέσο συνυπάρχον με τον αέριο "ξενιστή". Χρησιμοποιώντας αριθμητικές, ασυμπτωτικές και πειραματικές τεχνικές μελετάται η αλληλεπίδραση διαφόρων μηχανισμών μεταφοράς (λόγω αδράνειας, θερμοφόρησης, διάχυσης Brown) σε κεκαμμένες ροές οριακού στρώματος. Ο πραγματικός ρυθμός εναπόθεσης εξαρτάται από την πιθανότητα προσκόλλησης των σωματιδίων στην εναπόθεση, S . Με τη σειρά της αυτή καθορίζεται από την αλληλεπίδραση του προσπίπτοντος σωματιδίου με τα σωματίδια που έχουν ήδη επικαθίσει. Το S διακυμαίνεται ανάλογα με την εξελισσόμενη μορφολογία της εναπόθεσης, η οποία είναι συνάρτηση των συνθηκών της διεργασίας. Η χρήση διαφόρων αλγοριθμικών μοντέλων που βασίζονται σε υπολογιστικές προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας διακριτά σωματίδια (π.χ. Diffusion Limited Aggregation, Ballistic Deposition, Gravitational Deposition) συμβάλλει καθοριστικά στη διερεύνηση των δομικών ιδιοτήτων των σωματιδιακών συσσωματωμάτων που απαντώνται σε ποικίλα επιστημονικά πεδία. Περιγράφονται τα γενικά χαρακτηριστικά της διαδικασίας εναπόθεσης, όπως η εξέλιξη του S και η εξάρτηση τότε από την ταχύτητα και γωνία πρόσπτωσης. Τα αποτελέσματα αυτών των υπολογιστικών "πειραμάτων" συνοψίζονται σε νομοτελειακές εξισώσεις που παίζουν ρόλο συνοριακών συνθηκών σε συνεχή μοντέλα αύξησης εναποθέσεων.

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Βασίλης Μπαλτζής, Associate Professor, Department of Chemical Engineering, Chemistry and Environmental Science, New Jersey Institute of Technology, U.S.A.

ΘΕΜΑ : Biological Scrubbing of Volatile Organic Emissions.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων, Τμήμα Χημικών Μηχανικών.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Παρασκευή, 10 Ιανουαρίου 1992.

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Biological filters can be used for removing organic carbon emissions from air streams. In actuality, the toxic substances are mineralized in the filter. This is what makes this method preferable to using beds of activated carbon where substances are only trapped, but not treated. Furthermore, activated carbon technology is expensive (for carbon renewal), while biofilters do not require frequent regeneration, and thus, their operating costs are expected to be very low.

We have used a biological filter consisting of a microbial consortium immobilized on an optimized support (mixture of peat/perlite) for removing VOC's such as methanol, butanol, mixtures of benzene/toluene, BTEX mixtures, and for vapors of chlorinated solvents. We have obtained very satisfactory removal rates. For the case of single pollutants we have developed a mathematical model which describes the data very well. Numerical studies predict possible multiplicity of steady states. We are in the process of upgrading the model for describing data from mixtures. Experimentally, we are in the process of setting-up "pilot"-scale units (3m height, 25-35 cm diameter).

In this talk data sets and modelling results will be shown and discussed. The discussion will also refer to the notion of co-metabolism (for TCE degradation for example).