



ΟΜΙΛΗΤΗΣ: Dr. Γεώργιος Μπουλουγούρης
Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβειο Πολυτεχνείο

ΥΠΕΥΘΥΝΟΣ ΠΡΟΣΚΛΗΣΗΣ: Dr. Β. Μαυραντζάς, Τμ. Χημικών Μηχανικών, Παν. Πατρών,
vlasis@chemeng.upatras.gr

ΘΕΜΑ: Εργαλεία μαθηματικής προτυποποίησης σχεδιασμένα για να συνδέσουν τις μακροσκοπικές ιδιότητες της ύλης με τους μοριακούς μηχανισμούς που τις διέπουν.
Mathematical modeling tools, designed to unveil the molecular mechanisms of thermodynamic and dynamical properties of matter.

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΕΙΧΗΜΥΘ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Τετάρτη, 19 Νοεμβρίου 2008

ΩΡΑ: 12:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Η πρόβλεψη των μακροσκοπικών ιδιοτήτων της ύλης με βάση την χημική τους σύσταση αποτελεί ένα από τους βασικούς στόχους της Μοριακής Προσομοίωσης. Παρά τις σημαντικές προόδους και επιτυχίες που έχει να επιδείξει τα τελευταία χρόνια η Μ.Π., οι ανάγκες της σύγχρονης χημικής βιομηχανίας οδηγούν στην αντιμετώπιση ολοένα και πιο σύνθετων φυσικών συστημάτων προβάλλοντας νέες προκλήσεις για την ανάπτυξη στοχευμένων μεθοδολογιών που να επιτρέπουν την προσομοίωση σε μεγάλο εύρος κλιμάκων χώρου αλλά και χρόνου. Στην ομιλία αυτή θα παρουσιαστούν οι βασικές αρχές τέτοιων μεθόδων καθώς και οι εφαρμογές τους σε προβλήματα όπως, η ισορροπία φάσεων υδατικών διαλυμάτων (υδροφοβικό φαινόμενο) και οι μηχανικές και δυναμικές ιδιότητες υαλωδών πολυμερών.



ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Predicting the physical properties of materials from their chemical constitution is highly desirable, but also challenging, because of the extremely broad spectra of length and time scales governing their structure and molecular motion. In this presentation we will discuss the fundamental principals and provide example applications of new methods designed to overcome these challenges creating a connection between the molecular mechanism and the thermodynamic and dynamic properties of matter in complex systems driven by the needs of modern chemical industry: **a) Fluid Phase Equilibrium**: We will start from methods that investigate F.Ph.E. in aqua's systems and relate the cost of creating a cavity to the low solubility of apolar solutes in water (one of many aspect of the hydrophobic effect). **b) Monte Carlo sampling**: How it is possible to enriches ensemble averages in any Markovian stochastic process by including all possible outcomes of real of "ghost" Monte Carlo moves, and how this can help in equilibrating glassy systems, **c) Structural relaxation and mechanical properties in polymer glasses**: A strategy, based on the energy landscape picture of glasses, which has been designed to overcome the formidable challenge posed by the existence of extremely long characteristic times, by viewing relaxation as a sequence of infrequent transitions between local minima of the energy in configuration space. The evolution of the glassy system is tracked via analytical solution of a master equation for the probabilities of occupancy of the local minima. Through this "Dynamic Integration on a Markovian Web" (DIMW) strategy, one can expand (by many orders of magnitude) the time spans that can be simulated. Application to glassy atactic polystyrene has yielded promising results for the characteristic frequencies and mechanisms of sub-glass relaxation transitions. Finally we will show how it is possible to "isolate" and analyze a relaxation mode, opening new perspectives in our understanding of dynamical relaxation experiments.

Sort abstract:

Predicting the physical properties of materials from their chemical constitution is highly desirable, but also challenging, because of the extremely broad spectra of length and time scales governing their structure and molecular motion. In this presentation we will discuss the fundamental principals and provide example applications of new methods designed to overcome these challenges creating a connection between the molecular mechanism and the thermodynamic and dynamic properties of matter in complex systems driven by the needs of modern chemical industry.