

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

**ΟΜΙΛΗΤΗΣ** : Dr. Zafiria Nomikou, Surface Science and Catalysis Program,  
Center for Advanced Materials, Lawrence Berkeley  
Laboratory, Berkeley, California, USA

**ΘΕΜΑ** : Ethylidyne Mobility on Platinum Surfaces

**ΤΟΠΟΣ** : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

**ΗΜΕΡ/ΝΙΑ** : Δευτέρα, 20 - 12 -

**ΩΡΑ** : 7.00 μ.μ.

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ** : In this study we attempt to tackle an important question in catalysis: Does surface mobility distinguish a catalytic poison from a benign spectator species?

Ethylene hydrogenation takes place in the presence of a strongly bound ethylidyne overlayer which is neither a reactive intermediate nor a reactive site blocking poison.

We use a semi-empirical quantum mechanical method, namely the extended Hueckel theory, to get useful information on the energetics of surface diffusion of ethylidyne on Pt(111).

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

**ΟΜΙΛΗΤΗΣ** : Δρ. Αρης Τερζής, Ινστιτούτο Επιστήμης Υλικών, ΕΚΕΦΕ  
"Δημόκριτος".

**ΘΕΜΑ** : Tetraphenylporphyrin Lattice Clathrates: Structural  
Syntematics and Applications of a Large Class of Molecular  
Solids".

**ΤΟΠΟΣ** : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

**ΗΜΕΡ/ΝΙΑ** : Δευτέρα, 13 - 12 - 1993

**ΩΡΑ** : 7.00 μ.μ.

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ** : Analysis of the molecular packing in over 200 tetraarylporphyrin-based lattice clathrates reveals a strong conservation of host structure. In most cases, formation of porphyrin-based clathrates can be viewed as arising from intercalation of guest molecules into pure host materials. Several modes of intercalation are detected, and characteristic of intercalate structures, staging is observed. Intercalate formation accounts for the relative insensitivity of the host structure to the nature and size of the guest species. The structural conservation observed in this large class of materials facilitates rational modification of the host lattice. Crystallographic data are provided for 75 new porphyrin-based clathrates.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Ioannis Bitsanis, Associate Professor Department of  
Chemical Engineering, University of Florida, Gainesville,  
Florida 32611.

ΘΕΜΑ : "Υαλοποίηση και Κρυστάλλωση Μοριακών Υγρών σε  
διεπιφάνειες με στερεά"

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 18 Οκτωβρίου 1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Professor Michel Boudart, Department of Chemical  
Engineering, Stanford University, Stanford, California, USA

ΘΕΜΑ : Concepts in the kinetics of catalytic system

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Πέμπτη, 1 - 7 - 1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Turnover Frequency; Kinetic coupling; virtual fugacity; isotope jump technique; structure insensitive reactions. These concepts will be critically reviewed and applied to recent examples in heterogeneous catalysis.

Σ Ε Μ Ι Ν

PORTO-210

30-6-93

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ Μ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗ

PHOTO 210

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Professor Michel Boudart, Department of Chemical Engineering, Stanford University, Stanford, California, USA.

ΘΕΜΑ : The search for metal support interactions

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 30 - 6 - 1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : One possibility is that the support or the metal act as a vehicle for the supply or withdrawal of reactants or products by surface diffusion. In the case of the oxidation of carbon monoxide on alumina supported palladium, the role of surface diffusium of carbon monoxide on the support to the metal has been evidenced by studies on model systems pioneered by Poppa and Ladas. These model catalysts are prepared by evaporation in UHV of palladium vapor onto a sapphire support where the metal grows into clusters characterized by TEM and TPD. The supply of carbon monoxide to the clusters via the support can inhibit or increase the rate of reaction depending on temperature.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Yannis G. Kevrekidis, Chemical Engineering & Program  
in Applied and Computational Mathematics, Princeton  
University, USA.

ΘΕΜΑ : Some case studies of spatio-temporal patterns: reactions and  
flows.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 28 - 6 - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : This talk is a quick overview of a number of computational and  
experimental pattern formation problems that we have been studying with  
collaborators over the last two years.

(a) The first case study is looking at some of the standing waves during CO-  
oxidation obtained by G. Ertl's group in Germany. This is work with Katharina  
Krischer from Berlin, and involves image processing including KL- reduction - of  
the data, and an artificial neural network- based model, capable of reproducing  
the short term and long- term attractors of the system.

(b) The second is looking at a spatiotemporal period doubling during the  
electrodissolution of Fe in sulphuric acid. This is a circular electrode dissolving,  
and a spatially nonuniform standing wave periodic solution breaks to (a family of)  
spatiotemporally period-doubled Standing Waves. Here the interest is in the  
experiments (done in Jack Hudson's lab), and in image processing, since there is  
no quantitative PDE model for the problem.

(c) The third case study is the onset of three-dimensionality in the wake behind a  
circular cylinder (with periodic spanwise boundary conditions). The "Ponies" two  
dimensional oscillation undergoes at least two bifurcations to a spatiotemporally  
period doubled, three-dimensional oscillation. Here the emphasis is in the  
computations (done in collaboration with G. Karniadakis using spectral element  
codes) and looking at the symmetry of the results.

I will also discuss some ongoing work with Dr. Michael Graham, on alternative  
ensembles and weights for the KL-decomposition using a 1-D reaction - diffusion  
example.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Βασίλειος Μανουσιουδάκης, Καθηγητής, Chemical Engineering  
Department, UCLA, Los Angeles, USA

ΘΕΜΑ : Ελαχιστοποίηση αποβλήτων μέσω βελτιστοποίησης και σύνθεσης  
δικτύων εναλλαγής μάζας.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 21 - - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η ομιλία θα καλύψει αρχικά τις δραστηριότητές μου στις  
περιοχές μοντελοποίησης, αυτομάτου ελέγχου και σχεδιασμού χημικών  
διεργασιών. Ο κύριος κορμός της ομιλίας περιστρέφεται γύρω από την σύνθεση  
δικτύων εναλλαγής μάζας (MEN) και τη σημασία τους για την ελαχιστοποίηση  
αποβλήτων. Μια σειρά προβλημάτων και προτεινομένων λύσεων θα  
παρουσιασθεί, μεταξύ τους είναι:

- . Ελαχιστοποίηση κόστους αναλωσίμων για δίκτυα με δοσμένους ή και  
μεταβλητούς στόχους συγκεντρώσεων.
- . Δίκτυα απόσταξης σαν αλληλεπιδρώντα δίκτυα εναλλαγής μάζας και  
θερμότητας.
- . Λύση προαναφερομένων προβλημάτων με τεχνικές ολικής βελτιστοποίησης.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. L. Louis Hegedus, Vice President for Research, W.R. Grace  
& Co., Research Division, Columbia, MD 21044, USA

ΘΕΜΑ : Catalysis: Technology for a Clean Environment

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 21 Ιουνίου 1993

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : After a brief review of the U.S. air pollution picture and the technological implications of recent U.S. environmental regulations, the talk will focus on advanced emission control technologies, with examples taken from the author's laboratories. These include the electrically heated auto exhaust converter; catalytic oxidation of volatile organic compounds, oxidation reduction, and dual-function gas turbine emission control catalysts; a new catalyst for the selective reduction of nitrogen oxides in coal-fired power plant stack gases; and a "dry" combined denox-desox technology currently undergoing pilot-scale evaluation. Research frontiers of the above technologies will be pointed out.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Κώστας Κράβαρης, Αν. Καθηγητής Τμήματος Χημικών  
Μηχανικών, Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσ/νίκης

ΘΕΜΑ : Σύνθεση μη γραμμικών ρυθμιστών χημικών διεργασιών.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 16 - 6 - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Θα συζητηθεί το πρόβλημα της σύνθεσης ρυθμιστών για μη γραμμικές χημικές διεργασίες, με βάση δυναμικό μοντέλο σε καταστατική μορφή. Η έννοια της σχετικής τάξης θα χρησιμοποιηθεί για τον χαρακτηρισμό των δυναμικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των μεταβλητών εισόδου και εξόδου. Θα αναπτυχθεί γενική μεθοδολογία σύνθεσης ρυθμιστών ανάδρασης που επάγουν γραμμική συμπεριφορά εισόδου - εξόδου σε κλειστό βρόχο. Η θεωρία θα εφαρμοσθεί για την ρύθμιση θερμοκρασίας σε αντιδραστήρα πολυμερισμού εργαστηριακής κλίμακας.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : N.J.Bjerrum, Assoc. Prof. Chemistry Department A, The  
Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark

ΘΕΜΑ : Redox chemistry of niobium in Flinak melts

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τρίτη, 15-6-1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The electrochemical reduction of Nb (V) in  $K_2NbF_7$ -LiF-NaF-KF-Na<sub>2</sub>O melts has been investigated by cyclic voltammetry as a function of the oxide content. The measurements were carried out at 700°C using a working electrode and a counter electrode of platinum. As a reference electrode, either a platinum wire or a Ni/NiF<sub>2</sub> electrode with a LaF<sub>3</sub> membrane was used. In the case without oxide added two reduction peaks were observed (at -0.70V and -1.06V referred to the Ni/NiF<sub>2</sub> electrode). The peak currents increase with the  $K_2NbF_7$  concentration. It is known that Nb (V) is present as  $NbF_7^{2-}$  in such melts and it is concluded that this complex is reduced to metallic niobium in two steps. When oxide is added the peaks at -0.70V and -1.06V decrease, and a new reduction peak appears at -0.90 V. In this region three oxidation peaks are observed. At a molar ratio of oxide to niobium of one, the latter peak at -0.90 V is the only reduction peak that was observed. Raman spectroscopic measurements show that at this composition niobium (V) is present as  $NbOF_5^{2-}$ . We conclude that this complex is reduced in one step. In mixed chloride-fluoride melts the same reduction mechanism was observed by Konstantinov et al.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

## ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

### ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : B.Gilbert, Professor, Universite de Liege Laboratoire de Chimie Analytique, Liege, Belgique.

ΘΕΜΑ : Raman spectroscopy on cryolite and fluoroaluminates mixed with an alkali chloride chloroaluminate melts

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 14-6-1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Since several years, we have initiated an investigation of the structure of cryolite and related melts by Raman spectroscopy. Previous works were dealing with NaF-AlF<sub>3</sub> mixtures of various compositions and were interpreted in terms of the existence of three fluoroaluminate complex species, AlF<sub>6</sub><sup>3-</sup>, AlF<sub>5</sub><sup>2-</sup> and AlF<sub>4</sub><sup>-</sup>. Because these species are subject to controversy, we shall present two sets of new measurements which can be understood only on the basis of the model we are proposing.

The results obtained with KF-AlF<sub>3</sub> mixture will be first discussed and compared with those obtained with NaF-AlF<sub>3</sub>. As expected, the spectra exhibit much narrower bands which allows a better separation of the three components. It will also be shown that the larger the alkali cation is, the more AlF<sub>5</sub><sup>2-</sup> and AlF<sub>4</sub><sup>-</sup> are stabilized.

As second example the behaviour of NaCl mixed with NaF-AlF<sub>3</sub> will be presented. The main conclusions are the following:

1) the experimental measurements can be fully understood with our model involving the three above mentioned fluoro complexes,

2) there is no chlorofluoroaluminate species formed in the Na<sub>x</sub>AlF<sub>(3+x)</sub><sup>-</sup> NaCl (x≥2) mixtures whatever the amount of added NaCl,

3) the NaCl behaves as an acid and shifts the equilibria toward the formation of AlF<sub>4</sub><sup>-</sup>.

This unexpected acidic behaviour has been explained quantitatively by a dilution effect occurring upon NaCl addition and allows us to calculate the distribution of all the AlF<sub>x</sub><sup>(3-x)-</sup> complexes in the ternary systems NaF-AlF<sub>3</sub>-NaCl.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Kurt Nielsen, Assoc. Prof. Chemistry Department B, The  
Technical University of Denmark, Lyngby, Denmark

ΘΕΜΑ : Angles, Bonds and Hybridization

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 9 - 6 - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The notion of hybridization may be used to explain variations in molecular bond lengths and angles due to differences in the chemical surroundings. This use of hybridization as an explanatory tool will be applied to variations in the geometry of 1,2,3- triazole and to the geometries of vanadium sulfate complexes.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Thomas Bley, WIP-Projektgruppe Biosignale, Leipzig,  
Germany

ΘΕΜΑ : Monitoring and Modeling of Synchrony and Periodic Phenomena  
in Microbial Population Dynamics

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Πέμπτη, 3 Ιουνίου 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : For understanding and efficiently controlling the dynamical properties of biotechnological processes with microbial population, it is necessary to measure and to model the distribution over a spectrum of physiological states coupled with specific performances. The laser flow cytometry is a method which permits to characterize a high number of cells in a short time (1000 - 10000 per second). The combination of different features as the concentration of a fluorescent marked intracellular component and morphological features detected by scattered light permit a quantitatively differentiation of populations with individuals of different physiological states and performances, typically for transient states of fermentation processes, and of mixed populations. For describing these state distributions in mathematical models structures segregated models are necessary. Because of its complicated mathematical apparatus in a continuous state space and the resulting problems by parameter estimations they are hard to handle and play an only subordinated role in bioengineering. A discretization of the state space, adequately to the state distributions monitored by flow cytometry, allows starting with basic models to describe state distributions practicably. As a result the partial differential equations are transformed into delay-differential equations which are more graphic for non-model-specialists, too. In these equations the variables correspond with different physiological states of single cells. It is shown that such models can map real synchronized cultures in a correct manner with very few parameters - a retardation term for the minimum cell cycle duration, a milieu-dependent transition rate between the states, and some stoichiometric coefficients. Simple basic models serve as modules for describing more complicated processes. The advantages of such a bottom-up strategy versus a top-down strategy, in which a complete representation of the systems knowledge from the beginning, are shown. The suitability of such delay-differential equations for the development of efficient periodic control strategies is demonstrated by certain simulation experiments.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Herbert Naarmann, Plastics Research Lab., BASF, Germany

ΘΕΜΑ : Molecular arrangements and properties of perconjugated polymers.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 26 - 5

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : This contribution focuses on the developments in polymers containing conjugated - HC = CH - bonds. Orientation and controlled packing yields astonishing improvements of polymer properties:

Parallel ordered fibrils of polyacetylene, stacked - shishkebab - thienyl arylenes, self dopant polyindophenines with trident structures, rodlike ordered self dopant thienyl groups containing Liquid Crystals, rubberlike electrically conducting polymers with elongation rates 200%, highly ordered ferromagnetic systems with  $k_c$  55°, well defined two dimensional organic ribbons with graduated thermal stability and light absorption correlated to the condensation grade.

On the other hand well defined porous electrically conducting materials (foams or membranes) with holes (0.1 - 1μm) open new application areas eg. for drug release and medical treatments.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. B. Biscans, INP / ENSIGC, Laboratoire de Genie Chimique

ΘΕΜΑ : Crystallization of an active substance from emulsion droplets.  
Identification of a mechanism of formation of the agglomerates.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ Παρασκευή, 21 - 5 - 1993

ΩΡΑ : 12.00 μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Most dosage forms are: capsules, pellets, tablets... They are made from powders whose properties must be reproducible. Generally, crystallization and granulation are the two necessary steps to confer adequate properties to the initial powders (flowability, compressibility...). Our study refers to tablets. In this lecture a new process combining crystallization and granulation is described. The final products are spherical agglomerates of fine crystals, free flowing, easily packable and compressible. The aim of this work is to establish the interaction between this new process and the usage properties of the dosage forms obtained.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. C. Laguerie, INP / ENSIGC, Laboratoire de Genie Chimique.

ΘΕΜΑ : Modelling of a continuous fluidized bed crystallizer. Effects of mixing and segregation on crystal size distribution during the crystallization of tetrahydrate sodium perborate.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ Πέμπτη, 20 - 5 - 1993

ΩΡΑ : 12.00 μ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Continuous classifying crystallizers are widely used in the industry to produce crystals of uniform size. When the bed is made of particles of different sizes, the particle size distribution is influenced by two opposite phenomena: classification and dispersion.

Classification results from the movement of particles of different masses. Dispersion is induced by irregular motions of the solid. Perfect classification or perfect mixing of the solid in the fluidized bed, are two extreme situations. More often, a mixing zone is created between two layers of classified particles, allowing to partial classification within the bed.

Modelling of a continuous fluidized bed crystallizer is developed in this lecture. The model is based on the description of the fluidized bed as a multistage crystallizer, in order to take into account the segregation and particles mixing within the bed.

This model is compared to experimental data obtained during the laboratory scale crystallization of tetrahydrate sodium perborate (SPB). It gives a better prediction of the mean size of product than an usual model of suspended bed based on the assumption of perfect size classification. It can also predict the size distribution of the crystals along the column.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

## ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

### ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Sotiris R. Pratsinis, Associate Professor of Chemical Engineering, Centre for Aerosol Processes, University of Cincinnati.

ΘΕΜΑ : Aerosol Synthesis of Ceramics: The Role of Dopants in Formation of Titania Powders.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 12 - 4 - 1993

ΩΡΑ : 12.00 μ

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Aerosols are not only the products of commercial spray cans! In general, aerosol are suspensions of liquid droplets or solid particles in gases. Traditionally, aerosol science has been devoted to the prevention of the deleterious effects of aerosols on human health and environment. Aerosol processes, however, are quite attractive for synthesis of materials and most notably ceramics since they do not involve the tedious steps and large liquid volumes of wet chemistry processes. In addition aerosol can produce materials of high purity. As result, these processes are used in manufacture of carbon blacks, pigmentary titania, fumed silica and optical fibers. More recently, aerosol processes are explored for synthesis of diamonds, fullerenes, nanophase/ nanosize materials and structural/ electronic ceramics. A fundamental study on the generation of submicron titania is presented. Gas phase synthesis of titania from titanium tetrachloride ( $\text{TiCl}_4$ ) oxidation in the presence of dopants ( $\text{SiCl}_4$ ,  $\text{POCl}_3$ , and  $\text{BCl}_3$ ) was systematically investigated in an aerosol flow reactor as a function of temperature (1300-1700 K) and dopant concentration (3-25 mole % of  $\text{TiCl}_4$  concentration). Powder morphology, chemical and phase composition and size distributions were obtained using scanning and transmission electron microscopy (SEM / TEM), EDS analysis, nitrogen adsorption (BET), X-ray diffraction and the differential mobility particle sizer (DMPS). The addition of dopants drastically altered the morphology of titania particles from polyhedral to spheroidal, increased the extent of aggregation, reduced the primary particle size and decreased the rutile content. The observed changes in morphology and crystallinity were explained in terms of ionic radii size and valence of the dopant element. A novel approach describing the dynamic evolution of the size and shape of aerosol made, irregular, fractal-like particles from first principles will be outlined, provided that time is permitting.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Theodore T. Tsotsis, Department of Chemical Engineering,  
University of Southern California.

ΘΕΜΑ : Studies of Transport and Reaction with Membranes

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 5 - 4 - 1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : In this talk we will present results of our studies of transport and reaction with model membranes. We have utilized a number of such microporous membranes ranging from polycarbonate and anodic alumina membranes, which have straight, non-intersecting pores, to asymmetric Sol-Gel alumina flat and cylindrical membranes.

The primary goal of our research with such membranes is to gain additional fundamental knowledge about the mechanism of transport of macromolecules under both reactive and non-reactive conditions. Of particular interest are cases for which the porous structure of the membrane is changing as a result of the reactive processes, as is the case with the upgrading of heavy oils due to the deposition of metals and coke. The implications of our theoretical and experimental findings for optimal catalytic upgrading reactor design will be discussed.

An area of interest [1] is the use of such membranes for catalytic membrane applications. Theoretical and experimental aspects of such reactors will be discussed using the dehydrogenation of low MW hydrocarbons as the test reaction.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Γιώργος Νουνεσής, Research Scientist, Francis Bitter  
National Magnet Laboratory, M.I.T.

ΘΕΜΑ : Κρίσιμα Φαινόμενα σε Συστήματα Υγρών Κρυστάλλων:  
Πειραματικές Μελέτες με Χρήση Φασματοσκοπίας Ακτίνων Χ  
και AC Θερμιδομετρίας.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Πέμπτη, 18 Μαρτίου 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Πειραματικές τεχνικές όπως η σκέδαση ακτίνων Χ και η AC θερμιδομετρία χρησιμοποιήθηκαν για τη μελέτη των συνεχών, (δεύτερης τάξης), μεταβολών φάσης, Νηματική - Σμεκτική-A και Σμεκτική-A - Εξατική-B, σε συστήματα υγρών κρυστάλλων.

Η τεχνική της σκέδασης ακτίνων Χ απέδωσε μετρήσεις μεγάλης ακριβείας των μηκών συσχέτισης  $\xi_{||}$  και  $\xi_{\perp}$  και της επιδεκτικότητας της παραμέτρου τάξης  $\sigma$ . Η AC θερμιδομετρία απέδωσε μετρήσεις της ειδικής θερμότητας  $C_p$  και της θερμικής αγωγιμότητας  $K$ .

Τα πειραματικά δεδομένα για την Νηματική - Σμεκτική-A μετάβαση φάσης αναλύθηκαν επιτυχώς με βάση τις θεωρητικές προβλέψεις της XY τάξης παγκοσμιότητας σε τρεις διαστάσεις, (3D XY Universality Class). Τα δεδομένα για τη Σμεκτική-A - Εξατική-B μετάβαση αναλύθηκαν στο πλαίσιο των θεωριών τήξης σε δύο διαστάσεις, (2D melting theories).

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Κ. Βύρας, Επ. Καθηγητής Τμήματος Χημείας Πανεπιστημίου Αθηνών.

ΘΕΜΑ : Δομή Πολυμερών με Φασματοσκοπία Laser Raman.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 15 - 3

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η φασματοσκοπία Laser Raman έχει αποδειχθεί ότι είναι μια τεχνική η οποία μπορεί να δώσει σημαντικές πληροφορίες για τη μορφολογία και τη δομή των πολυμερών. Στην περίπτωση των κρυσταλλικών πολυμερών και στην περιοχή των χαμηλών συχνοτήτων ( $<150 \text{ cm}^{-1}$ ) ο πλέον χαρακτηριστικός συντονισμός είναι αυτός που οφείλεται στη διαμήκη ταλάντωση όλης της αλύσεως (LAM-1). Οι συχνότητες LAM-1 εξαρτώνται από διάφορους παράγοντες όπως είναι το μήκος της αλύσεως, η κρυσταλλικότητα, η θερμοκρασία, το βάρος ακραίων ομάδων ή ακόμα και οι διαμοριακές δυνάμεις στα άκρα των αλύσεων. Κατάλληλα μοντέλλα έχουν αναπτυχθεί για τον θεωρητικό υπολογισμό των συχνοτήτων LAM-1. Στην περίπτωση των αμόρφων πολυμερών και γενικότερα των αμόρφων υλικών, στην περιοχή χαμηλών συχνοτήτων παρουσιάζεται ένας ευρύς συντονισμός (με μέσο εύρος  $40 \text{ cm}^{-1}$ ). Ο μηχανισμός σκεδάσεως, αυτών των συντονισμών δεν είναι ακόμη καλά κατανοητός. Οι θεωρίες συγκλίνουν στο ότι το φαινόμενο οφείλεται σε μορφές ταλαντώσεων που είναι χαρακτηριστικές της έλλειψης τάξης στη δομή, ενός υποθετικού πλέγματος, δεχόμενες στα άμορφα υλικά, διεγέρσεις τύπου φωνονίων με αποτέλεσμα, να δίδεται η εξήγηση γιατί οι θερμοχωρητικότητες των υλικών αυτών (σε χαμηλές θερμοκρασίες) έχουν μεγαλύτερες τιμές από αυτές που προβλέπει η θεωρία Debye για τα κρυσταλλικά υλικά.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Ιωάννης Δημ. Πετσαλάκης, Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής  
Χημείας, Εθνικό Ιδρυμα Ερευνών.

ΘΕΜΑ : Φασματοσκοπία διατομικών μορίων.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 8 - 3 - 1993

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Μέσα στα πλαίσια της προσέγγισης των Born - Oppenheimer παρουσιάζεται η αντιμετώπιση μοριακών διαδικασιών που συμβαίνουν με ή χωρίς την εκπομπή (ή απορρόφηση) φωτός χρησιμοποιώντας δύο αναλυτικές θεωρητικές μεθόδους με πραγματικές ή μιγαδικές συναρτήσεις βάσης. Προβλήματα όπως της εκπομπής φωτός, της προδιάσπασης της αλληλεπίδρασης δεσμευμένων και συνεχών καταστάσεων (σε δυαδικό ή πολυκαναλικό επίπεδο), της φασματοσκοπίας μεταβατικών καταστάσεων και της φωτοδιάσπασης αντιμετωπίζονται με ικανοποιητική ακρίβεια για τα διατομικά μόρια ενώ για μεγαλύτερα συστήματα η ακρίβεια των υπολογισμών είναι συνάρτηση του μοριακού χαρακτήρα τους. Τέλος παρουσιάζεται μέθοδος υπολογισμού διαβατικών καταστάσεων (καταστάσεων που μας δίνουν τις δυνάμεις που ασκούνται σε δύο συστήματα όταν το ένα πλησιάζει το άλλο). Εφαρμογές σε πραγματικά συστήματα επιβεβαιώνουν ή προβλέπουν συστήματα laser και διαχωρίζουν τους διάφορους χαρακτήρες που συμμετέχουν στη δημιουργία των μοριακών καταστάσεων.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Ε. Κολυφέτης, Υποψήφιος Διδάκτορας Τ.Χ.Μ.

ΘΕΜΑ : Μαθηματική μοντελοποίηση προασβεστοποιητή και φλόγας  
κάρβουνου περιστροφικού κλιβάνου βιομηχανίας τσιμέντου.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων Τ.Χ.Μ.

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Σάββατο, 13 - 2 - 1993

ΩΡΑ : 12.00 π.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Ο προασβεστοποιητής είναι ένας τυπικός αντιδραστήρας μεταφερόμενης κλίνης. Σ' αυτόν εισάγονται η φαρίνα ( $\text{CaCO}_3$ ) και άλλες πρώτες ύλες), κονιοποιημένο πηλός και κάρβουνο και ο τριτογενής αέρας. Το κάρβουνο εισάγεται έτσι ώστε καιόμενο, να δώσει την απαιτούμενη ενέργεια για να πραγματοποιηθεί η ασβεστοποίηση που είναι ισχυρά ενδόθερμη αντίδραση. Αναπτύχθηκε μαθηματικό προμοίωμα του προασβεστοποιητή. Το μοντέλο επιλύθηκε αριθμητικά και τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με βιομηχανικές μετρήσεις. Το μοντέλο εφαρμόστηκε για να διερευνηθεί η επίδραση των διαφόρων φυσικοχημικών παραμέτρων στην απόδοση του προασβεστοποιητή, καθώς επίσης για να μελετηθεί και βελτιωθεί ένα υφιστάμενο σύστημα προασβεστοποίησης.

Όσον αφορά στην ανάπτυξη του μοντέλου της φλόγας του κονιοποιημένου κάρβουνου του περιστροφικού κλιβάνου προσομοιάστηκαν τα φυσικά και χημικά φαινόμενα που πραγματοποιούνται μέσα σ' αυτήν, με την βοήθεια μαθηματικών μοντέλων (k-ε τυρβώδες μοντέλο, Μοντέλο ακτινοβολίας  $E_{\text{Xi}}$  Ανηγμένων Ροών) και αλγεβρικών σχέσεων (Διφασική μεταφορά μάζας, ορμής και ενέργειας) για τυρβώδεις ροές με ανακυκλοφορία και χημική αντίδραση. Για την διαμόρφωση των ισοζυγίων εφαρμόστηκε η προσέγγιση κατά Euler, τόσο για την στερεή όσο και για την αέρια φάση. Για την αριθμητική επίλυση του μαθηματικού μοντέλου χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των άνω ελέγχου.

Ο έλεγχος της αξιοπιστίας των αποτελεσμάτων έγινε με δύο τρόπους: α) Με κατασκευή ενός ψυχρού μοντέλου νερού (τεχνική ανάμιξης οξέος / βάσης) και β) Με σύγκριση των αποτελεσμάτων με βιομηχανικά δεδομένα (θερμοκρασιακή κατανομή κέλυφους περιστροφικού κλιβάνου). Τέλος με εφαρμογή του μοντέλου έγινε παραμετρική ανάλυση για να συγκριθούν δύο τύποι βιομηχανικών καυστήρων.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Δρ. Αθανάσιος Κούγκολος, Πανεπιστήμιο της Οκαγιάμα,  
Ιαπωνία

ΘΕΜΑ : Χρήση του *Sacharomyces cerevisiae* στην μελέτη της  
τοξικότητας χημικών ουσιών, της σχέσης τοξικότητας και  
βιοσυσσώρευσης, της συνδυασμένης τοξικότητας πολλών ουσιών  
και βλαβών του DNA από τοξικές ουσίες.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Δευτέρα, 8 - 2 - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Αυτή η ερευνητική εργασία αποτελεί ένα πρωτόκολλο χρήσης του *Sacharomyces cerevisiae* σε διάφορα προβλήματα τοξικότητας. Καταρχάς εξετάστηκε η επίδραση διαφόρων μορφών υδραργύρου οργανικού και ανοργάνου στον *Sacharomyces cerevisiae*. Η τοξικότητα του οργανικού υδραργύρου ήταν δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτήν του ανοργάνου και αυτό αποδείχθηκε ότι οφειλόταν στο ότι η βιοσυσσώρευση του οργανικού υδραργύρου ήταν κι αυτή δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη. Μετά εξετάστηκε η επίδραση άλλων βαρέων μετάλλων, όπως το κάδμιο, το νικέλιο, το χρώμιο, ο μόλυβδος. Αναπτύχθηκε ένα μοντέλο που να προβλέπει την προσδοκώμενη συνδυασμένη τοξικότητα, όταν πολλές χημικές ουσίες επιδρούν μαζί. Σε αρκετές περιπτώσεις η πειραματική τοξικότητα ήταν μεγαλύτερη της προσδοκώμενης, υπήρχε δηλαδή συνεργισμός των μετάλλων. Στην συνέχεια εξετάστηκε η επίδραση διαφόρων χλωροφαινόλης. Για τις χλωροφαινόλες αναπτύχθηκαν ποσοτικές σχέσεις που συνδέουν την ενεργότητα (τοξικότητα στην συγκεκριμένη περίπτωση) με την μοριακή δομή (Quantitative Structure Activity Relationship). Οι σχέσεις αυτές χρησιμεύουν ώστε από την τοξικότητα μιας χλωροφαινόλης να μπορεί να εξαχθεί κατά προσέγγιση η τοξικότητα άλλων. Τέλος εξετάστηκε η χρήση του *Sacharomyces cerevisiae* στην ανίχνευση ουσιών που προκαλούν βλάβες στο DNA (μεταλλάξεις). Θεωρείται ότι οι ουσίες που προκαλούν βλάβες στο DNA των μονοκυττάρων οργανισμών είναι πιθανότατα και καρκινογόνες. Εως σήμερα προκαρυωτικοί οργανισμοί (βακτήρια) χρησιμοποιούνται σε τέτοιες αναλύσεις όπως στο Ames test, ή στην Rec-assay ανάλυση. Στην εργασία αυτή χρησιμοποιήθηκε ο ευκαρυωτικός οργανισμός *Sacharomyces cerevisiae*, του οποίου η δομή του κυττάρου είναι πλησιέστερη προς αυτήν του ανθρώπινου κυττάρου.

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

**ΟΜΙΛΗΤΗΣ** : Μιχάλης Κορνάρος, Μεταπτυχιακός Υπότροφος Τμήματος  
Χημικών Μηχανικών

**ΘΕΜΑ** : Προσομοίωση και Βελτιστοποίηση Διεργασιών.  
Απονιτροποίησης

**ΤΟΠΟΣ** : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

**ΗΜΕΡ/ΝΙΑ** : Δευτέρα, 1 - 2 - 1993

**ΩΡΑ** : 6.00 μ.μ.

**ΠΕΡΙΛΗΨΗ** : Η απονιτροποίηση είναι μια βιολογική διεργασία που στοχεύει στην απομάκρυνση του αζώτου (νιτρικών) κατά την τριτοβάθμια επεξεργασία υγρών αποβλήτων. Η διεργασία αυτή πραγματοποιείται από ετερότροφα προαιρετικά αερόβια βακτήρια, κάτω από ανοξικές συνθήκες σε δύο στάδια: α. αναγωγή των νιτρικών σε νιτρώδη, β. αναγωγή των νιτρώδων σε αέριο άζωτο. Για το σχεδιασμό της διεργασίας της απονιτροποίησης απαιτείται μαθηματικό μοντέλο που να μπορεί να περιγράφει το ρυθμό ανάπτυξης των μικρο-οργανισμών και της απονιτροποίησης κάτω από αερόβιες, ανοξικές και μεταβατικές συνθήκες. Για το σκοπό αυτό επιλέχθηκε η μελέτη μιας καθαρής καλλιέργειας ενός αντιπροσωπευτικού απονιτροποιητικού οργανισμού (*Pseudomonas Denitrificans*). Πραγματοποιήθηκαν πειράματα κάτω από αερόβιες και ανοξικές συνθήκες, με περιοριστικό υπόστρωμα τόσο την πηγή άνθρακα όσο και τον τελικό αποδέκτη ηλεκτρονίων (νιτρικά, νιτρώδη). Το μαθηματικό μοντέλο το οποίο θα προβλέπει τη συμπεριφορά των απονιτροποιητικών βακτηριδίων υπό αερόβιες, ανοξικές και μεταβατικές συνθήκες, μπορεί να χρησιμοποιηθεί στη συνέχεια για το βέλτιστο σχεδιασμό και λειτουργία διεργασιών προαπονιτροποίησης, μεταπρονιτροποίησης, απονιτροποίησης βιομηχανικών λυμάτων σε αντιδραστήρα CSTR και σε αντιδραστήρα διαλείποντος έργου με διαδοχική λειτουργία (Sequencing Batch Reactor).

# Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Παπαγεωργίου Δημήτριος, Μεταπτυχιακός Υπότροφος  
Τμήματος Χημικών Μηχανικών

ΘΕΜΑ : Οξειδωτική Σύζευξη του Μεθανίου προς Ανώτερους  
Υδρογονάνθρακες.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τρίτη, 19 - 1 - 1993

ΩΡΑ : 6.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η οξειδωτική σύζευξη του μεθανίου (O.C.M. reaction) προς σχηματισμό ανωτέρων υδρογονανθράκων αποτελεί μια ενδιαφέρουσα πρόκληση στο χώρο της κατάλυσης τόσο για βασική έρευνα αλλά και για πρακτική εφαρμογή λαμβάνοντας υπ όψιν τα τεράστια αποθέματα φυσικού αερίου. Η δυσκολία του προβλήματος συνίσταται στη σταθερότητα του δεσμού C-H, στα ανεπιθύμητα προϊόντα καύσης ( $\text{CO}_x$ ) και στο συνδυασμό ομογενών και ετερογενών αντιδράσεων. Σαν βάση για την παρασκευή καταλυτών χρησιμοποιήθηκε το οξείδιο του τιτανίου ( $\text{TiO}_2$ ) ενισχυμένο με κατιόντα υψηλότερου ( $\text{W}^{6+}$ ,  $\text{Ta}^{5+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$ ) και χαμηλότερου σθένους ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ) στο κρυσταλλικό του πλέγμα. Η ενίσχυση επιφέρει μεταβολές στις φυσικοχημικές ιδιότητες τόσο της επιφάνειας όσο και του πλέγματος. Στην παρούσα εργασία γίνεται μια προσπάθεια να συσχετισθούν οι μεταβολές αυτές με αλλαγές στην ενεργότητα και εκλεκτικότητα των καταλυτών. Την καλύτερη καταλυτική συμπεριφορά παρουσίασε το οξείδιο του τιτανίου ενισχυμένο με λίθιο. Σ' αυτό τον καταλύτη μελετήθηκε η επίδραση της συγκέντρωσης του ενισχυτή (dopant), της θερμοκρασίας αντίδρασης, της θερμοκρασίας ενίσχυσης, των μερικών πιέσεων μεθανίου και οξυγόνου καθώς επίσης και η σταθερότητά του. Παρουσιάζεται η χρήση τεχνικών όπως της μελέτης της κινητικής της αντίδρασης κάτω από δυναμικές συνθήκες (transient technique) TPD & TPO. Επίσης παρουσιάζονται καταλυτικά αποτελέσματα χρήσης μικτών οξειδίων,  $\text{Li}/\text{TiO}_2$  και άλλων οξειδίων ( $\text{CaO}$ ,  $\text{Sm}_2\text{O}_3$ ), των οποίων η καταλυτική συμπεριφορά είναι ανώτερη από αυτή των συστατικών που τα αποτελούν (φαινόμενο συνέργειας).