



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΓ

**ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ
&
ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ**

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Associate Professor A. Sabanis, Institute of Technology,
School of Chemical Engineering

ΘΕΜΑ : Ιστολογική Μηχανική (Tissue Engineering); Τεχνολογίες
Αιχμής και Εφαρμογή τους στο Τεχνητό Πάγκρεας

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Δευτέρα, 22-12-97

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Η Ιστολογική Μηχανική (Tissue Engineering) είναι μία σχετικά καινούργια περιοχή της βιοτεχνολογίας που ασχολείται με την δημιουργία τεχνητών ιστών για μεταμόσχευση σε ασθενείς ή/και με την ελεγχόμενη αναγέννηση τραυματισμένων ή δυσλειτουργούντων ιστών *in vivo*. Οι τεχνολογίες αιχμής που απαιτούνται για πρόοδο στον τομέα αυτόν συνίστανται στις τεχνολογίες κυττάρων, βιολογικών, τρισδιάστατης αρχιτεκτονικής των ιστών, και αποτελεσματικής ενσωμάτωσης των ιστών στο σώμα του ασθενούς. Η έρευνα στην περιοχή αυτή απαιτεί συνεργασία μηχανικών, βιολόγων και γιατρών. Στην παρουσίαση αυτή θα εξετάσουμε τις τεχνολογίες αιχμής όπως αυτές σχετίζονται με την ανάπτυξη ενός τεχνητού παγκρέατος που είναι λειτουργικό, σχετικά φθινό, και μπορεί να παραχθεί στην απαιτούμενη κλίμακα για ιατρικές εφαρμογές. Λόγω της περιορισμένης διαθεσιμότητας ανθρώπινων και ζωικών κυττάρων που εκκρίνουν ινσουλίνη και της δυσκολίας απομόνισής τους από παγκρεατικούς αδένες, χρησιμοποιούμε γενετικά μετασχηματισμένα κύτταρα. Τα κύτταρα αυτά μπορούν να αυξηθούν στους απαιτούμενες αριθμούς σε βιοαντιδραστήρες κάτω από ελεγχόμενες συνθήκες. Τα κύτταρα εσωκλείονται σε ημιπερατά σφαιρίδια αλγινικού οξέως/πολυλυσίνης ή σε θερμοπλαστικές μεμβράνες για προστασία από το ανοσοποιητικό σύστημα του ασθενούς. Μοντέλα αντιδράσεως/διαχύσεως χρησιμοποιούνται για την περιγραφή του συστήματος και για τον προσδιορισμό καταλλήλων τιμών ορισμένων παραμέτρων. Βιοαντιδραστήρες σταθερής κλίνης, υποστηριζόμενοι από κυκλώματα ροής θρεπτικών υλικών και συμβατοί με όργανα μαγνητικού πυρηνικού συντονισμού, χρησιμοποιούνται για την μελέτη των τεχνητών ιστών και της βιοχημείας των κυττάρων υπό συνθήκες που προσομοιάζουν αυτές που επικρατούν *in vivo*. Οι τεχνητοί ιστοί μεταμοσχεύονται σε μικρά ζώα (αρουραίους) που έχουν καταστεί διαβητικά για την μελέτη της αποτελεσματικότητάς τους στην αποκατάσταση φυσιολογικών τιμών γλυκόζης στο αίμα. Τα αποτελέσματα είναι ενθαρρυντικά για την ανάπτυξη ενός τεχνητού ιστού που να αντιμετωπίζει τον σακχαρώδη διαβήτη αποτελεσματικότερα από τις ενέσεις ινσουλίνης.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ
&
ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΑΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ

· Prof. Peter Schwartz,
Current Address: Arbeitsbereich Kunststoff und
Verbundwerkstoffe, Technische Universität Hamburg, Harburg
Denickestrasse 15, 21073 Hamburg, DE
Permanent Address: Department of Textiles and Apparel
Cornell University, Ithaca, NY 14853-4401, USA

ΘΕΜΑ

: Monte Carlo simulation of the strength and creep rupture of carbon/epoxy microcomposites

ΤΟΠΟΣ

: Αίθουσα Σεμιναρίων ΕΙΧΗΜΥΘ-ΙΤΕ, Πλατάνι, Ρίο

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ

: Πέμπτη, 4 12 97

ΩΡΑ

: 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Micromechanical models of 7-fiber bundles with regular hexagonal packing are used as a unit cell for larger composite structures. Bundle strength distributions are developed using Weibull distributions for single fiber strength and chain-of-bundles models and localised load-sharing rules. For bundles creep-rupture, the matrix is assumed exhibit power-law creep. Monte Carlo methods are used to simulate the bundles in simple tensile tests and creep-rupture, and the results are compared to experimental values. The results of some parametric studies are also presented.

Neutron scattering techniques are used for research across a broad spectrum of scientific disciplines: chemistry, biology, solid state physics, magnetism, nuclear physics, material science, etc. The instruments used in a central facility, such as the Institut Laue-Langevin in Grenoble, are not rigidly defined. Constant improvements and developments are constantly opening new areas of research. This statement is valid in the field of zeolites where the different molecular motions of translation, rotation, and vibration can now be probed on time scales ranging from 1 fs to 10 ns. Examples concerning mainly diffusive motions will be given and compared with results obtained from other experimental techniques and simulation methods.

Dr. Hervé Jobic

Institut de Recherches sur la Catalyse

CNRS, Villeurbanne, FRANCE

Seminar: Τρίτη, 25 Νοεμβρίου 7:00μμ
Αίθουσα Συνεδριάσεων Τμήματος ΧΗ

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ

ΕΙΧΗΜΥΘ/ΙΤΕ & Τμ. Χημ. Μηχανικών

ΟΜΙΑΗΤΗΣ Sotirios J. Vahaviolos, PhD, President & Chairman
MISTRAS Holdings Corporation & its Physical Subsidiaries

ΘΕΜΑ Acoustic emission: A new REAL TIME NDE technique

ΤΟΠΟΣ Αίθουσα Σεμιναρίων ΕΙΧΗΜΥΘ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ 18/11/97

ΩΡΑ 13:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The Technology Transfer of Acoustic Emission (AE) from Laboratory to Industry has been commercially available for over twenty five (25) years. Has any progress been made? This talk will discuss the evolution of the technology of AE in instrumentation applications, standards and codes and its overall acceptance world-wide. As the newcomer in the NDE industry, AE was tried on applications where the other technologies had previously failed or where wild financial cost savings were promised. The issue of suitability of AE for an application was never considered until the early 80's when a new breed of industrial and university researchers entered the field in USA, Europe and Japan. AE "noise counting" was replaced with basic work on wave propagation, mode conversion, source characterization, the study of the inverse problem using a number of Green's functions, etc. While the university academic worked hard to identify certain AE waveform features with source and failure mechanisms a number of industrial researchers explored in addition, a myriad of "pseudo-sources" of AE and their statistical nature. Instead of absolute one-on-one correlations and exact location of defects, practitioners developed data bases based on case studies that enabled them to relate AE to fracture mechanics corrosion phenomena, and overall part integrity assessment especially in pressurized systems and individual components.

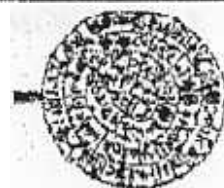
The introduction of Artificial Intelligence & Neural Networks coupled with the existent data bases led to the development of knowledge based systems ready to be used on very complex structures that are found in refineries, chemical plants, complex pipelines, wind tunnels, wind tunnels, aircraft structures, etc. The hard work of the early 80's by CARP (Committee on AE for Reinforced Plastics) and the wide application of AE in testing of Fibreglass (FRP/GRP) vessels and pipes rejuvenated the technology. Early failures (?) in metal vessel testing were reconsidered especially after the successes of MONOPACTM (a commercially available knowledge based system), Tube Trailer Testing both in USA and Europe and Cool Down Testing in Refineries. These applications formed the basis of acceptance of AE by ASME and DOT (Department of Transportation) and, thus, gave credence to the newcomer NDE technology. In addition, the more than 15 AE ASTM Standards and AE's acceptance by ASNT as another major NDT technique and the establishment of Level III in AE was a major step forward for the technology world-wide.

Quantitative AE has now emerged as the basis of applications in concrete. Moment Tensor analysis AE Programs has helped several researchers/practitioners in Japan to evaluate a diverse group of concrete applications in both the Laboratory & the field.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΚΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΑΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Michel Robin, Institut Francais du Petrole, Ruel
Malmaison, France

ΘΕΜΑ : Wettability heterogeneities on planar minerals: Application to
reservoir rocks

ΤΟΠΟΣ Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Παρασκευή, 24 - 10 - 97

ΩΡΑ : 5.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Wettability is an important parameter for oil recovery efficiency; and its heterogeneity character is more and more considered for actual oil reservoir rocks.

Most of the reservoir rocks of intermediate wettability (i.e. spontaneously imbibing both water and oil) display heterogeneous wettability at pore scale, associated with the mineralogy or the geometry of the pore network. The problem is to describe the displacement of the oil/water interface in such a system. The work presented here discusses a preliminary approach with the simplifying assumption of a plane mineral surface.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Dr. Th. Dorfmueller, Universitat Bielefeld, Fakultat fur Chemie,
Physikalische Chemie I

ΘΕΜΑ : Προσομοίωση μακρομοριακών συστημάτων. Η δομή του τυχαίου

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : 13 Οκτωβρίου 1997

ΩΡΑ : 19:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Μεταξύ του πειράματος και της θεωρίας αναπτύχθηκε τα τελευταία χρόνια η τεχνική της προσομοίωσης με τον υπολογιστή (computer simulation). Με την μέθοδο αυτή προσπαθήσαμε να καταλάβουμε καλύτερα την μοριακή δομή και τη δυναμική σε δικτυωμένα υδατικά διαλύματα μακρομορίων.

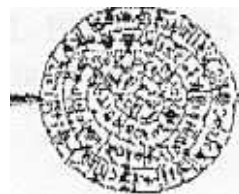
Τα μακρομόρια αυτά σχηματίζουν ζελατίνες (gels), οι οποίες έχουν μεγάλη σημασία στη βιολογία αλλά και σε παρούσες και μελλοντικές τεχνικές εφαρμογές. Τα συστήματα αυτά πρέπει να καταταχθούν ανάμεσα στην υγρά και τη στερεά κατάσταση τόσο στο μακροσκοπικό όσο και στο μικροσκοπικό επίπεδο περιγραφής. Ορισμένες φυσικές τους ιδιότητες αποκλίνουν προς το άπειρο όταν η συγκέντρωση των μακρομορίων πλησιάσει μια τιμή (percolation point). Προσπαθήσαμε να χαρακτηρίσουμε την μικροσκοπική μορφή των ζελατινών, η οποία παρόλο που είναι τυχαία παρουσιάζει μια χαρακτηριστική δομή.

Θα προσπαθήσω επίσης, να δείξω πως οι μελέτες αυτές μας οδήγησαν σε βασικά ερωτήματα για την δομή του τυχαίου και για την γνωσιολογική ένταξη της προσομοίωσης στην Φυσική και στην Χημεία.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΚΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Themis Lazaridis, Department of Chemistry, Harvard University

ΘΕΜΑ : Diversity and similarity in protein unfolding pathways

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Δευτέρα 6-10 - 97

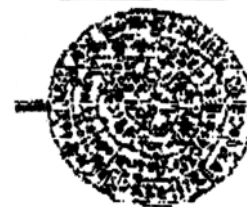
ΩΡΑ 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : An implicit solvation potential in conjunction with the CHARMM polar hydrogen force field is used in high temperature molecular dynamics simulations to obtain 24 unfolding trajectories for the small protein chymotrypsin inhibitor 2. The trajectories agree well with those obtained by simulations in explicit water. The order of disappearance of native contacts between the structural elements of the protein is used to define pathways of unfolding. It is found that multiple pathways are possible. However, there is strong preference for a certain order along the pathways. In most trajectories, opening of the hydrophobic core occurs before complete destruction of the secondary structure. These results suggest two nucleation sites for folding, one at the α -helix and another at a portion of the β -sheet. This work provides a synthesis of the "new" and the "classical" view of protein folding and show that a preferred average pathway is not incompatible with a funnel-like energy surface.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

**ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ**

&

**ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ**

- ΟΜΙΛΗΤΗΣ** : Prof. P. Roca i Cabarrocas, Laboratoire de Physique des Interfaces et des Couches Minces (UPR 258 CNRS), Ecole Polytechnique, F-91128, Palaiseau, Cedex France
- ΘΕΜΑ** : Nanoparticle formation in low-pressure silane plasmas: Bridging the gap between a-Si:H and μ -Si films
- ΤΟΠΟΣ** : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ
- ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ** : Τρίτη, 15 - 7 - 97
- ΩΡΑ** : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Over the last thirty years, much progress has been achieved in the understanding of the growth mechanisms and optoelectronic properties of hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) and microcrystalline silicon (μ -Si) films. While SiH_4 is considered to be the main a-Si:H precursor, atomic hydrogen is known to be a key element for μ -Si growth. The search for high deposition rates in plasma processes is often limited by the formation of powders. We here show that by using plasma conditions close to the formation of powders it is possible to deposit nanostructured silicon films which present optical properties similar to those of a-Si:H but improved transport properties. High-resolution transmission-electron-microscopy measurements reveal that nm-sized ordered regions exist in a-Si:H-like films prepared by standard RF glow discharge (13.56 MHz) under a wide range of plasma conditions such as pure silane and low temperature, hydrogen or helium dilution at high or low temperature. These plasma conditions share the fact of being close to the formation of powders as deduced from the evolution of the self-bias on the RF powered electrode, light-scattering measurements, and in-situ ellipsometry measurements. The presence of the ordered regions in the a-Si:H-like films is discussed in terms of discharge conditions in which nanoparticles which contribute to the growth of the film are formed.

The seminar will focus on the growth of nanostructured silicon films and its comparison with a-Si:H and μ -Si growth processes. The optical and transport properties of this new type of thin films will be discussed with respect to those of a-Si:H and μ -Si.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

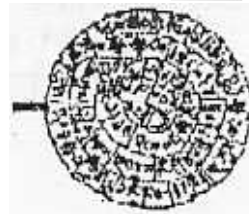
- ΟΜΙΛΗΤΗΣ** : Dr. Zehra Akdeniz, Physics Department, University of Istanbul, Istanbul, Turkey
- ΘΕΜΑ** : Structure of Charged Clusters in Trivalent Metal Alkali Halide Mixtures
- ΤΟΠΟΣ** : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ
- ΗΜΕΡ/ΝΙΑ** : 27 Ιουνίου 1997
- ΩΡΑ** : 19:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ A model of ionic interactions accounting for ionic polarizability through electrostatic and shell deformation dipoles is used to study the structure of complex ions with the trivalent metal ion. The results on FeCl_3 -based ionic clusters are compared to the results on AlCl_3 -based ones. Comparisons with data from experiment and from molecular orbital calculations are also presented.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΣΗΓΗΤΗΣ
ΓΙΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Gary L. Haller, Department of Chemical Engineering, Yale University, New Haven, CT 06520-8286

ΘΕΜΑ : From Kinetics to Dynamics: A Brief History of CO Oxidation

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Τετάρτη, 18-6-97

ΩΡΑ : 7pm

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The oxidation of CO on noble metals is one of those reactions that can be used to define the field of heterogeneous catalysis. It was one of the reactions used by Berzelius to invent the word "catalysis", the kinetics and mechanism are of continued academic interest, and the reaction is of technological importance for the control of air pollution. A brief and personal view of the history of the heterogeneously catalyzed CO oxidation will be used to illustrate levels of sophistication of mechanistic understanding.

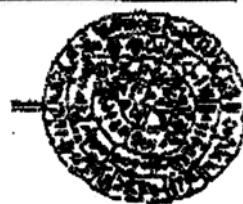
The emphasis will be on the frontier of mechanistic description where we attempt to describe the structure and dynamics of the activated complex. The most recent chapter in this saga involves a comparison of the dynamics of CO oxidation by oxygen atoms and molecules on Pt and Pd surfaces [1]. It is shown, that on both Pd and Pt, CO₂ molecules produced from CO oxidation by nascent oxygen atoms are more excited than CO₂ produced from CO oxidation by adsorbed oxygen atoms. This result indicates that the oxygen atoms are not fully accommodated before they react with adsorbed CO. The fact that the energy of nascent oxygen atoms is channelled into product CO₂ demonstrates that a different reaction mechanism is involved in CO oxidation by nascent oxygen atoms relative to CO oxidation by adsorbed oxygen atoms.

1. C. Wei and G.L. Haller, *J. Chem. Phys.*, **105**, 810 (1996).



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΛΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Leonidas Petrakis, Department of Applied Science,
Brookhaven National Laboratory, U.S.A.

ΘΕΜΑ : Asbestos: Technological challenge and science opportunity

ΤΟΠΟΣ : Αθήναι, Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ Τρίτη, 17 - 6 - 97

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

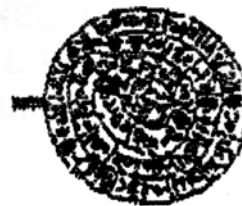
ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Asbestos, the "miracle material" has been used extensively during the last 50 years in thermal insulation and fireproofing. It also has been associated with several occupational diseases, and it has been classified by US regulatory agencies as a "regulated material". It is estimated that its abatement in the US will cost over \$100 billion.

Brookhaven has been involved with an industrial partner in developing a novel process that cuts the cost quite significantly. Advantage has been taken of the special facilities in the fundamental studies of this material with the very interesting structure and chemistry in the development of this new process. Those aspects which at this stage are in the public domain will be discussed.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Yohei Sato, Mechanical Engineering Department, Keio University, Japan

ΘΕΜΑ : Dynamics of Dispersed Two-Phase Flows

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Τρίτη, 17 -6- 97

ΩΡΑ : 12.00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : The presence of solid particles in turbulent flows can modify the structure of the turbulence and hence renders traditional empirical methodologies for single-phase flows unreliable. For example, the k-epsilon model should include extra terms and heat transfer and skin friction coefficients change by the presence of the solid phase.

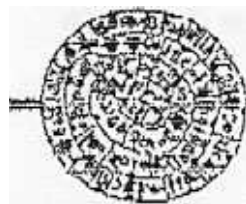
The presentation will focus on how particles modify turbulence and on various aspects of particle motion in turbulent flows. Topics covered in the talk include:

1. Turbulence modelling for dispersed two-phase flows.
2. Direct Numerical and Large Eddy Simulations of heat transfer by solid particles in decaying isotropic turbulence.
3. Particle dynamics in a turbulent channel flow by Lagrangian measurements.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Ioannis Kanetakis, Institut für Physikalische Chemie.
Universität Mainz

ΘΕΜΑ : Μεταφορική και Περιστροφική Διάχυση σε κολλοειδή και
άμορφα συστήματα. Πείραμα και σύγκριση με θεωρία.

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ Δευτέρα, 16 Ιουνίου 1997

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Κολλοειδή σφαιρικά σωματίδια χρησιμοποιούνται ως
συστήματα αναφοράς για την μελέτη της μεταφορικής και περιστροφικής διάχυσης μη
φορτισμένων σκληρών σφαιρών, ιδιαίτερα κοντά στην υαλώδη κατάσταση. Η
περιστροφική διάχυση δευτεριωμένων κολλοειδών σφαιρών από πολυστυρένιο σε
κατάλληλα αιωρήματα μελετάται με τεχνικές πυρηνικού μαγνητικού συντονισμού, με
σκοπό την μελέτη των υδροδυναμικών αλληλεπιδράσεων στην δυναμική
συγκεντρωμένων συστημάτων.

Ενα δεύτερο θέμα αφορά την διάχυση μικρών μορίων σε άμορφα ή πολυμερικά υλικά.
Αυτό το θέμα έχει αποκτήσει ιδιαίτερο ενδιαφέρον μετά την πειραματική ένδειξη ότι
περιστροφή και μεταφορά κοντά στην θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης
ακολουθούν διαφορετική συμπεριφορά με την θερμοκρασία και αναφορικά με το
μακροσκοπικό ιξώδες. Στην παρατήρηση αυτή έχουν δοθεί διάφορες εξηγήσεις
βασισμένες στην ύπαρξη μικροετερογενειών, η δυναμική των οποίων επηρεάζει με
διαφορετικό τρόπο την μεταφορά και την περιστροφή, και διάφορες τεχνικές έχουν
αναπτυχθεί για την επιλεκτική παρακολούθησή τους. Συζητείται η τεχνική της
οπτικής ολογραφίας, που επιτρέπει την ταυτόχρονη παρακολούθηση και σε πολύ
αργούς χρόνους της δυναμικής μοριακών και κολλοειδών συστημάτων.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Professor Manuel Laso, Department of Chemical Engineering,
ETSII - Madrid

ΘΕΜΑ : Calculating Some Universal Ratios for Coarse-Grained Chain
Models

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Τετάρτη, 11 - 6 - 97

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Chain models have been one of the mainstays of both analytical and simulational polymer physics for several decades. As a consequence of the desire to bridge the gap between atomistic and continuum mechanical descriptions of polymeric systems, there is a current growing interest in coarse-grained representations of long molecules.

Although inherently lacking chemical detail, simple bead-spring chains have the advantage of being amenable to analysis and, in general, allowing a more efficient sampling by simulation than dense atomistic systems. A particular advantage of some idealized coarse grained models is that it is possible to compute for them ratios of quantities (e.g. diffusivity, viscosity, etc.) in the limit of infinite chain length. These universal ratios are independent of specific chain parameters. More sophisticated bead-spring models are analytically intractable. The determination of the corresponding universal ratios is a conceptually very straightforward but numerically extremely demanding task. Algorithmic details for bead-spring chains with hydrodynamic interaction and excluded volume and their similarities and differences with respect to atomistic models will be presented as well as the best values currently available of the relevant universal ratios.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΚΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ

: Δρ. Μάνθος Παπαδόπουλος, Ινστιτούτο Οργανικής και
Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ιδρυμα Ερευνών

ΘΕΜΑ

: Μελέτη της πολωσιμότητας και των υπερπολωσιμότητων
επιλεγμένων μορίων με ημιεμπειρικές και *ab initio* μεθόδους

ΤΟΠΟΣ

: Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ

: Δευτέρα, 2 Ιουνίου 1997

ΩΡΑ

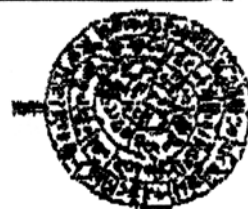
: 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Επί σειρά ετών κάναμε ευρεία χρήση μιας ημιεμπειρικής μεθόδου με σκοπό την μελέτη προβλημάτων και φαινομένων των οποίων η διερεύνηση συμβάλλει στην κατανόηση της μοριακής πόλωσης. Θα γίνει λοιπόν συνοπτική παρουσίαση και σχολιασμός των ευρημάτων που προέκυψαν απ' αυτό τον κύκλο των εργασιών. Ακολούθως ασχοληθήκαμε με τη χρήση και ανάπτυξη *ab initio* τεχνικών με σκοπό τη μελέτη των μη γραμμικών οπτικών ιδιοτήτων μικρών μορίων. Θα παρουσιασθούν λοιπόν τα πορίσματα που προέκυψαν απ' αυτό τον κύκλο των μελετών, με ιδιαίτερη αναφορά στο πρόβλημα επιλογής της κατάλληλης βάσης και τον υπολογισμό της συμβολής των δονήσεων στις υπό εξέταση ιδιότητες. Τέλος θα γίνει συνοπτική παρουσίαση των υπερπολωσιμότητων των υλικών που σχεδιάσαμε αξιοποιώντας τη τεχνογνωσία που αναπτύχθη τόσο από εμάς όσο και από άλλους εργαζόμενους στο πεδίο αυτό.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΚΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Καθηγητής κ. Σάββας Χατζηαυτιάκος, Department of Chemical Engineering, University of British Columbia, Vancouver, BC, Canada

ΘΕΜΑ : Appropriate Boundary Conditions for the Flow of Molten Polymers

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ ΝΙΑ : Τετάρτη, 28 Μαΐου 1997

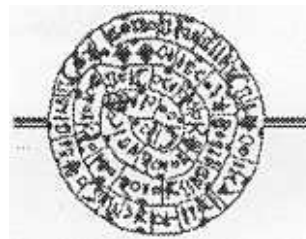
ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : There is considerable experimental evidence that the classical no-slip boundary condition of Fluid Mechanics is not always a valid assumption for the flow of high molecular weight polymers. In particular, it has been observed that molten polymers slip at solid walls when the wall shear stress exceeds a critical value. The slip velocity itself has been found to depend on a number of factors including the wall shear stress, wall normal stress, molecular weight and its distribution and most importantly on the polymer/wall interfacial conditions. In addition, it has also been observed that there exists another critical wall shear stress value for transition from a weak to a strong slip. The latter corresponds to an almost plug flow and is accompanied by oscillations of pressure drop in the case of capillary flow generated by a constant speed piston-driven capillary rheometer. Theoretical descriptions of slip phenomena have also suggested the presence of slip for the flow of high molecular weight polymers. They have predicted the existence of a second critical wall shear stress value for transition from a weak to a strong slip. The various cases analyzed theoretically include (i) passive or ideal interfaces (ii) low surface densities of polymer chains adsorbed at the wall and (iii) high surface densities of polymers chains adsorbed at the wall. In all these cases, the existence of slip has been predicted and has been found to be in accord with experimental observations. Recently a Brownian dynamics simulation method has been developed to simulate polymer/wall interface under flow conditions. This method has predicted the existence of slip at a critical wall shear stress value. The dynamics of the slip process predicted through the simulations have been found to be in agreement with experimental observations.



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Dr. Mark Wilson, Physical and Theoretical Laboratory,
University of Oxford

ΘΕΜΑ : Covalent Effects in Ionic Systems Networks Chains and Polyions

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : 19 Μαΐου 1997

ΩΡΑ : 19:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Recent developments in molecular dynamics computer simulation models has led to a larger number of systems being describable from an essentially ionic model than had previously been thought. These models include many-body effects in the form of anion dipole polarization. No recourse to "covalency" is required.

As a result, both structural and dynamical properties of non-fragile network-forming glasses (such as ZnCl_2 and SiO_2) can now be modelled effectively. For example, the origin of the first sharp diffraction peak (FSDP) in ZnCl_2 is now understood whilst considerable insight has been gained into the slow relaxation phenomena characteristic of such non-fragile glasses. Furthermore, the natural transferability of the models allows the breakup of the networks to be easily modelled by simply adding the suitable modifiers to the simulation cell. For SiO_2 the anion dipoles are found to play a significant role in reproducing the experimental infra-red spectrum which is not well reproduced by other (non-polarizable) potential models. The unusual "polymeric" structure of both liquid and crystalline BeCl_2 is found to be reproduced by the same model phenomenology (i.e simply by reducing the cation radius with respect to ZnCl_2).



Τμήμα Χημ. Μηχ/κών
Πανεπιστήμιο Πατρών

ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



ΕΙΧΗΜΥΘ
ΙΤΕ

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟΥ ΠΑΤΡΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΚΑΙ
ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ
ΙΔΡΥΜΑΤΟΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΚΑΙ ΕΡΕΥΝΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ

: Λεωνίδας Ρεσβάνης, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής,
Πανεπιστημίου Αθηνών

ΘΕΜΑ

NESTOR
ΤΗΛΕΣΚΟΠΙΟ ΝΕΤΡΙΝΩΝ

και

LAERTIS

ΠΟΛΥΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟ ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΒΑΘΕΙΑΣ ΘΑΛΑΣΣΑΣ

ΤΟΠΟΣ

: Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ

: Δευτέρα 7-4-97

ΩΡΑ

: 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

: Βασικό Αντικείμενο του Σεμιναρίου είναι η Εισαγωγή στην Αστρονομία Νετρίνων και η περιγραφή του υπό κατασκευή τηλεσκοπίου NESTOR (NEutrinos from Supernovae and Ten-sources Ocean Range)

Επιπλέον, θα περιγραφεί το πολυεπιστημονικό εργαστήριο βαθείας Θάλασσας LAERTIS (Laboratory in the Abyss of Europe with Real Time data transfer to Shore), το οποίο θα ποντισθεί μαζί με το τηλεσκόπιο NESTOR σε βάθος 4000 m στο φρέαρ των Οίνουσών ανοικτά της Πύλου.

Μικροσκοπικός Διαχωρισμός Φάσεων σε Συμπολυμερή κατά Συστάδες, Μορφολογία, Κινητική και Δυναμική.

Γ. Φλούδας

Ιδρυμα Τεχνολογίας Έρευνας, Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λέιζερ, Τ.Θ. 1527, 711 10 Ηράκλειο Κρήτης

Πολυμερικά μίγματα που προέρχονται από το συνδ^υσμάς δύο ή περισσότερων ομοπολυμερών χρησιμοποιούνται ευρύτατα για τη βελτίωση των μηχανικών, χημικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων των αρχικών συστατικών. Ο σχηματισμός ενός συμπολυμερούς κατά συστάδες είναι μία άλλη δυνατότητα ανάμιξης. Στα συμπολυμερή, τα δύο ομοπολυμερή έχουν συνενωθεί με ομοιοπολικό δεσμό που κάνει αδύνατο τον πλήρη διαχωρισμό των φάσεων επιτρέποντας μόνο το διαχωρισμό σε μικροσκοπική κλίμακα. Κατά τη διεργασία του μικροσκοπικού διαχωρισμού των φάσεων δημιουργούνται πολλές μικροδομές. Η δημιουργία των μικροδομών είναι αποτέλεσμα δύο συναγωνιζόμενων μηχανισμών. Από τη μία, οι ανόμοιες συστάδες έχουν τη τάση να διαχωρίζονται σαν αποτέλεσμα της χημικής τους ασυμβατότητας, από την άλλη όμως, η έκταση του διαχωρισμού είναι περιορισμένη εξ αιτίας του ομοιοπολικού δεσμού. Έτσι, δημιουργούνται περιοδικές μικροδομές που ανταγωνίζονται στην ελοχιστοποίηση της επιφάνειας επαφής μεταξύ ανόμοιων μορίων. Χαρακτηριστικό των μικροδομών είναι ότι το μήκος τους είναι παραπλήσιο με το μέγεθος της συστάδας - τυπικά 5 έως 50 νανόμετρα. Επομένως, η δημιουργία μιας συγκεκριμένης μικροδομής είναι πολύ ευαίσθητη στο κλάσμα όγκου, την εκλογή των μονομερών και του τρόπου συνδιασμού των συστάδων (μακρομοριακή αρχιτεκτονική). Αυτή η παρατήρηση έδωσε το έναυσμα συνεχών ερευνητικών - πειραματικών και θεωρητικών^{1,2} - μελετών σε μία προσπάθεια κατανόησης των φυσικών μηχανισμών που οδηγούν στον μικροσκοπικό διαχωρισμό. Σε αντιδιαστολή, στα μίγματα πολυμερών οι περιοχές διαχωρισμού των φάσεων είναι της τάξης αρκετών μικρομέτρων, επομένως το μέγεθος των περιοχών είναι ανεξάρτητο από το μέγεθος των ίδιων των μορίων.

Στην εργασία αυτή θα παρουσιαστούν τα πρόσφατα αποτελέσματα^{3,4} της μορφολογίας, της κινητικής αυτοοργάνωσης και της δυναμικής γραμμικών αλλά και μοντέλων μη-γραμμικών συμπολυμερών. Πιο συγκεκριμένα, η μορφολογία μελετήθηκε με σκέδαση ακτίνων Χ σε μακροσκοπικά προσανατολισμένα συμπολυμερή με χρήση εξωτερικής διάτμησης. Στην ομογενή περιοχή, εξετάστηκε η επίδραση της αρχιτεκτονικής στο στατικό παράγοντα δομής και τα πειραματικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με τη θεωρία μέσου πεδίου (mean-field theory). Η κινητική της αυτοοργάνωσης μελετήθηκε σαν συνάρτηση του μοριακού βάρους, του κλάσματος όγκου και της αρχιτεκτονικής με τη χρήση ρεολογίας. Τέλος, μελετήθηκε η δυναμική των πολυμερικών αλυσίδων στις περιορισμένες γεωμετρίες (φυλλοειδής, κυλινδρική, κυβική) των μικροπεριοχών με τη χρήση διηλεκτρικής φασματοσκοπίας.

Αναφορές

1. L. Leibler *Macromolecules* 13,1602(1980).
2. M. Olvera de la Cruz, I.C. Sanchez *Macromolecules* 19,2501(1986).
3. G. Floudas, S. Pispas, N. Hadjichristidis, T. Pakula, I. Erukhimovich *Macromolecules* 29,4142(1996)
4. G. Floudas, N. Hadjichristidis, M. Stamm, A.E. Likhtman, A.N. Semenov *J. Chem. Phys.* 106,000(1997).

Κον Δ. Θεοδώρου

Σεμινάριο στο Τμήμα Χημικών Μηχανικών του Παν. Πατρών

Ημερομηνία: Δευτέρα 17. Μαρτίου. 1997 - Ωρα: 7 μ.μ.

Αποτελέσματα επιδράσεων αλυσίδων και υποστρώματος στην υγρή χρωματογραφία των πολυμερών

Περίληψη

Μελετούμε τα αποτελέσματα των επιδράσεων μονομερών - υποστρώματος στην υγρή χρωματογραφία των πολυμερών. Δείχνουμε ότι η εκλουτική συμπεριφορά των αλυσίδων επηρεάζεται από αυτές τις επιδράσεις οι οποίες καθορίζουν την κατανομή των αλυσίδων μεταξύ του χώρου της κινούμενης φάσης και του χώρου των πόρων της στατικής φάσης. Θεωρούμε τους πόρους του στερεού υποστρώματος σαν διαπερατούς κύβους με εσωτερική αδιαπέρατη στερεή γωνία που αποτελείται από έδρες που επιδρούν με τα πολυμερή. Η ακμή του κύβου μήκους D εκφράζει το μέσο μέγεθος των πόρων. Γίνεται χρήση προηγούμενης αναλυτικής περιγραφής των πολυμερικών αλυσίδων που επιδρούν με επιφάνεια για μελέτη της πιθανότητας εύρεσης των αλυσίδων μέσα στους κύβους και καθορισμού έτσι του συντελεστή κατανομής των αλυσίδων μεταξύ της κινούμενης και στατικής φάσης. Η ύπαρξη τριών διαφορετικών τρόπων έκλουσης των αλυσίδων αναλόγως των επιδράσεων με το υπόστρωμα, η εξάρτηση από το μοριακό βάρος M των πολυμερών καθώς και η εξάρτηση από το μέγεθος των πόρων D περιγράφονται ικανοποιητικά. Παρουσιάζονται επίσης πειραματικά αποτελέσματα με πρότυπα πολυστυρένια που υποστηρίζουν την θεωρία.

Ομιλητής : Μ. Κοσμάς

Καθηγητής κος Μάριος Κοσμάς
Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων
Δευτέρα, 17 Μαρτίου 7:00 μμ

Σ Ε Μ Ι Ν Α Ρ Ι Ο

ΤΜΗΜΑΤΟΣ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

&

ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΟΥ ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟΥ ΧΗΜΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ
ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΩΝ ΔΙΕΡΓΑΣΙΩΝ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ : Prof. Antony N. Beris, Department of Chemical Engineering,
University of Delaware, Newark, DE 19716

ΘΕΜΑ : Direct Numerical Simulation of Polymer-Induced Drag
Reduction in Turbulent Channel Flow

ΤΟΠΟΣ : Αίθουσα Σεμιναρίων ΤΧΜ

ΗΜΕΡ/ΝΙΑ : Τετάρτη, 15 - 1 - 97

ΩΡΑ : 7.00 μ.μ.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ : Polymer-induced turbulent drag reduction refers to the substantial reduction of turbulent drag, 20-60%, effected by the addition of even very small amounts of soluble polymers in a solvent. Since the end of second world war, very substantial research efforts were undertaken to understand the turbulent drag reduction which have led to the accumulation of large amounts of experimental data; however, an a-priori calculation of the phenomenon based on an independently evaluated microscopic model has remained elusive. In this work, we demonstrate for the first time the polymer-induced drag reduction phenomenon through direct numerical simulations (DNS) of a fully turbulent channel flow of a dilute polymer solution. The polymer chains are modelled as non-interacting, finitely extensible elastic dumbbells and the time-dependent and three-dimensional flow calculations are carried out in a Cray T3D parallel computer using spectral approximations. The DNS predictions are consistent to those corresponding to previous experimental observations of turbulent flows of dilute polymer solutions and give credence to an explanation of the drag-reduction put forward by Lumley which involves the reduction in the polymer solution of the rate with which turbulent bursts are generated next to the wall. These results are encouraging for further usages of direct numerical simulations of time-dependent and/or three-dimensional viscoelastic flows in polymer processing applications.