

ΕΠΙΤΕΥΓΜΑΤΑ ΤΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

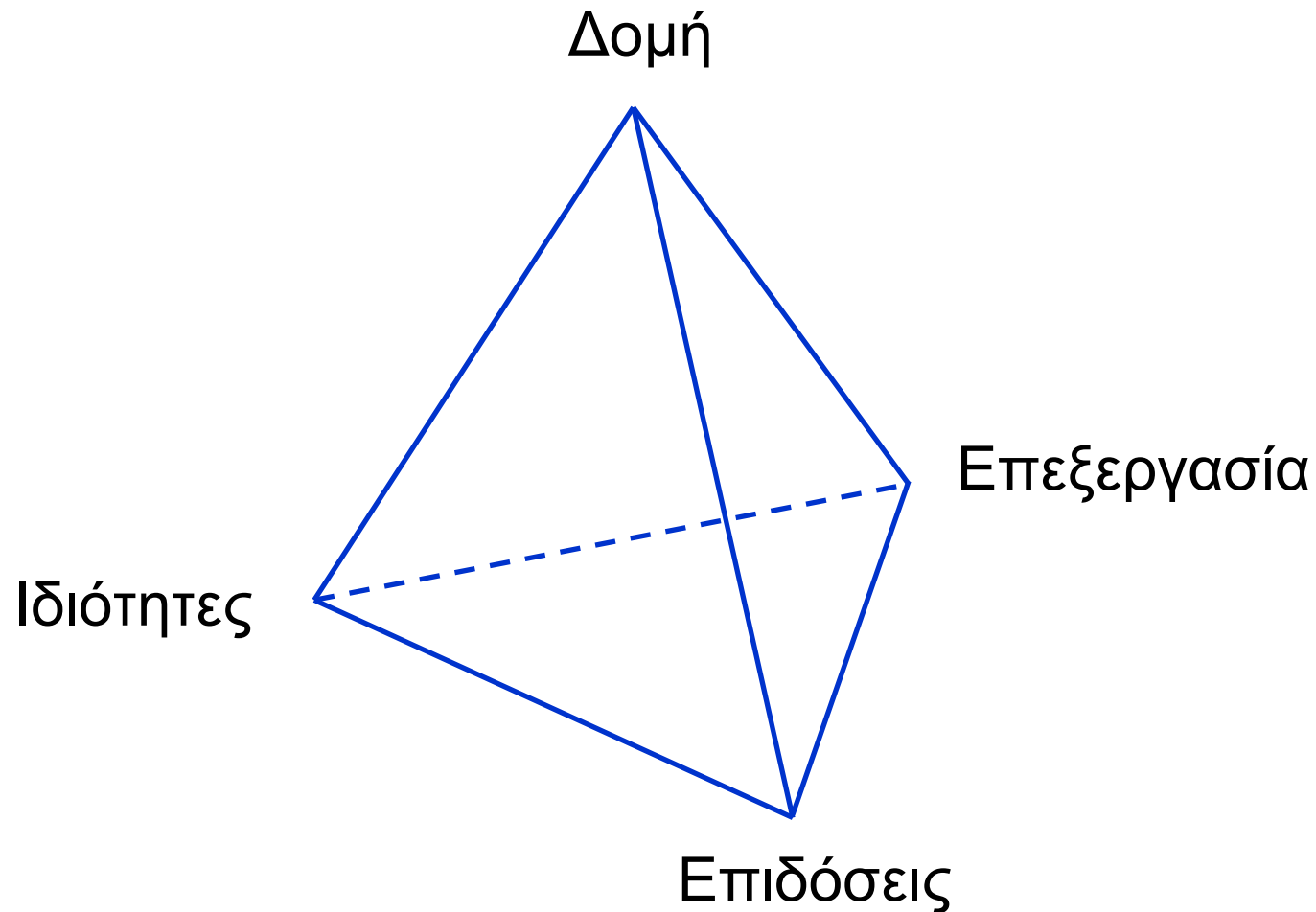


Δώρος Ν. Θεοδώρου & Ερευνητική Ομάδα

Σχολή Χημικών Μηχανικών, Τομέας Επιστήμης και
Τεχνικής των Υλικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο,
Πανεπιστημιούπολη Ζωγράφου, 157 80 Αθήνα

doros@central.ntua.gr
<http://comse.chemeng.ntua.gr>

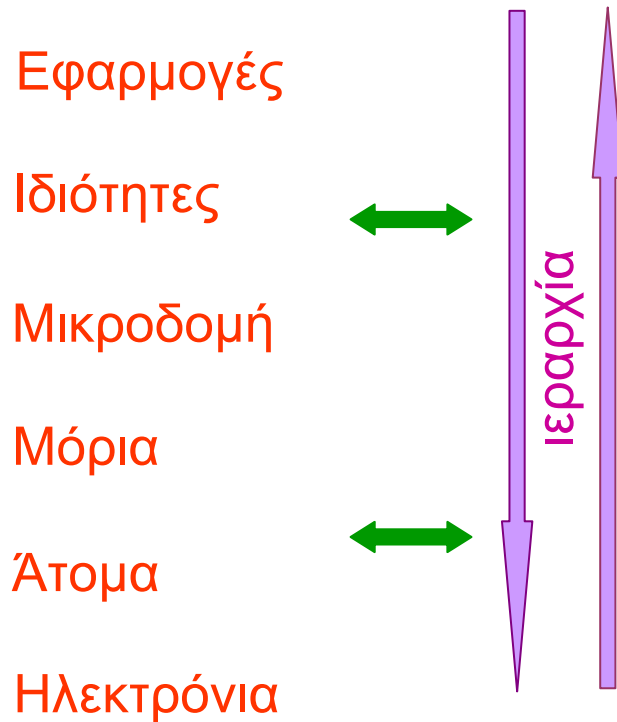
ΤΟ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΤΗΣ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ



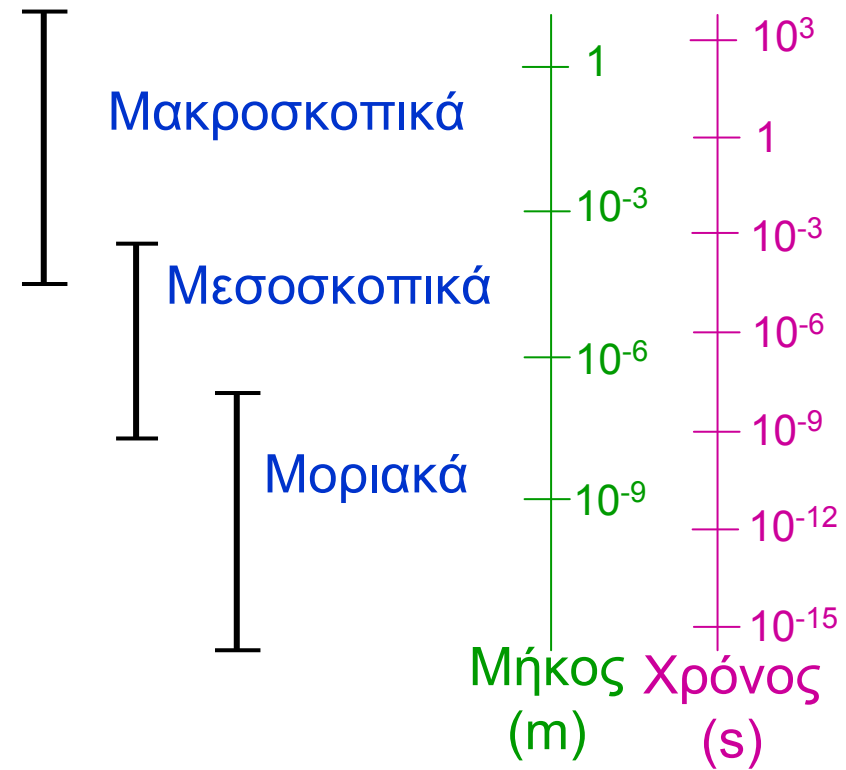
Επιθυμητή η υπολογιστική πρόρρηση σχέσεων δομής-ιδιοτήτων

ΠΡΟΚΛΗΣΗ: ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑ ΥΛΙΚΩΝ ΔΙΕΠΕΤΑΙ ΑΠΟ ΕΥΡΥΤΑΤΕΣ ΚΛΙΜΑΚΕΣ ΜΗΚΩΝ ΚΑΙ ΧΡΟΝΩΝ

Πραγματικός κόσμος



Παράλληλος κόσμος: Μοντέλα



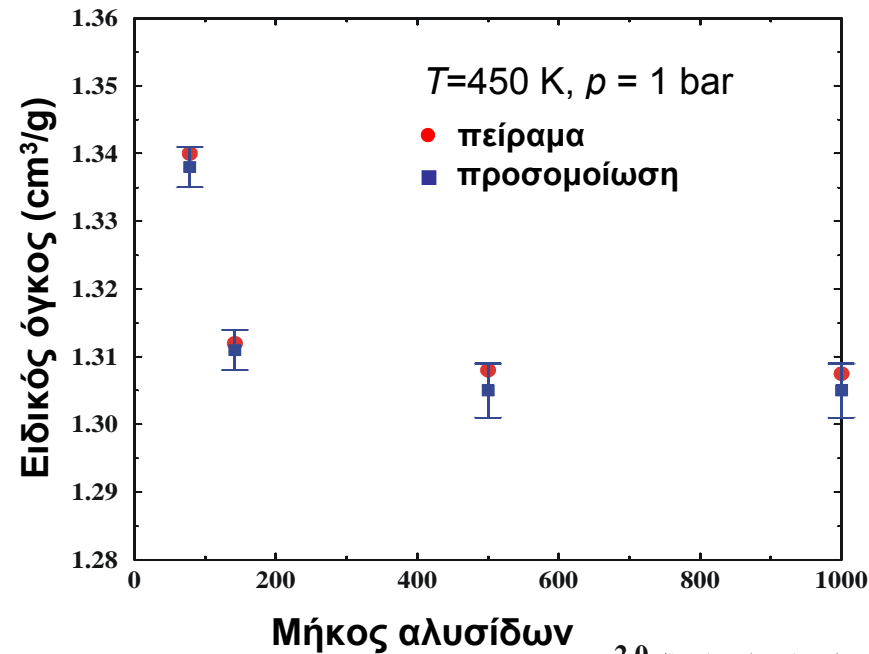
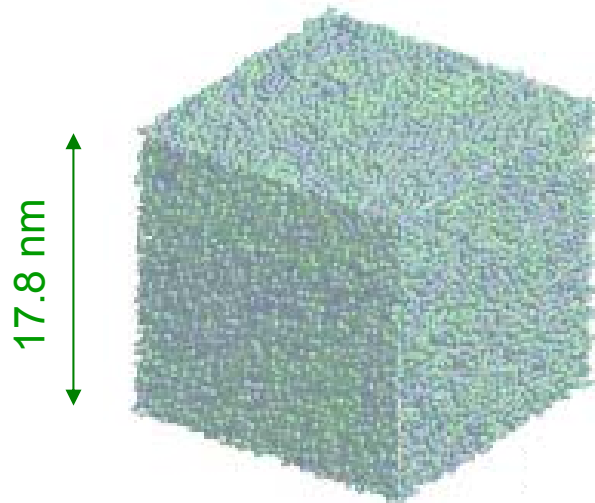
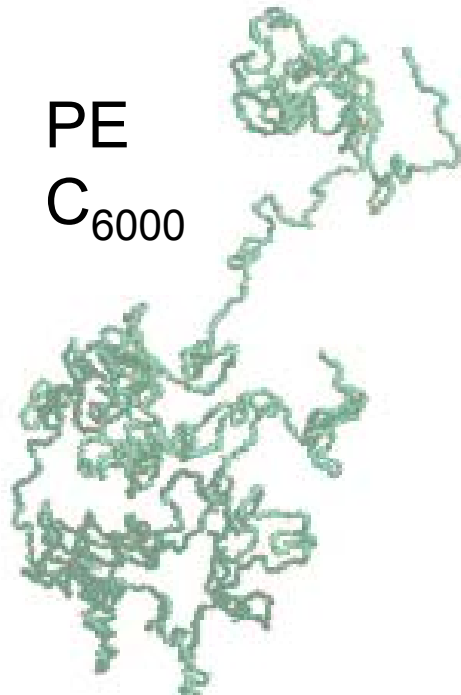
ΟΜΑΔΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ, Σ.Χ.Μ. Ε.Μ.Π.

Ίδρυση: 2002

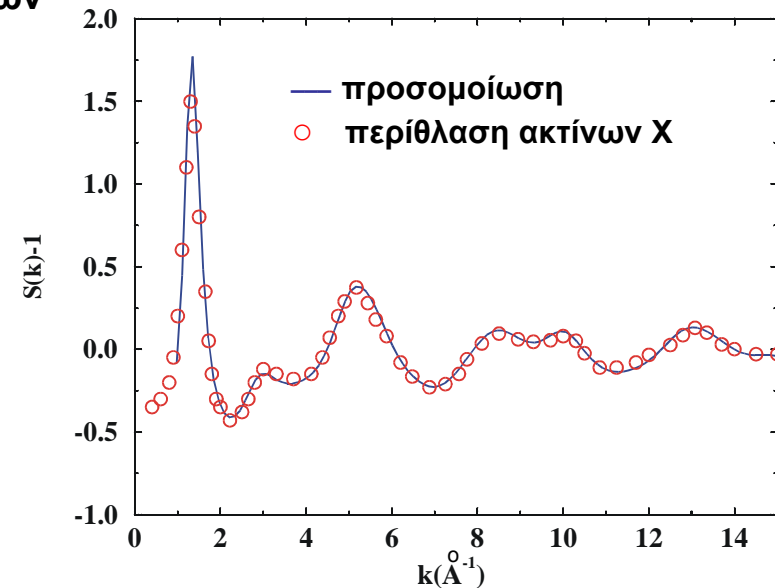
Αποστολή:

- Ανάπτυξη νέων, αποτελεσματικών υπολογιστικών μεθόδων για την ποσοτική κατανόηση και πρόρρηση των ιδιοτήτων υλικών μέσω ανάλυσης και προσομοίωσης σε ατομικό και μεσοσκοπικό επίπεδο
- Εφαρμογή αυτών των μεθόδων σε υλικά τεχνολογικού ενδιαφέροντος
- Συμβολή στην επίλυση προβλημάτων σχεδιασμού υλικών σε συνεργασία με τη διεθνή βιομηχανία

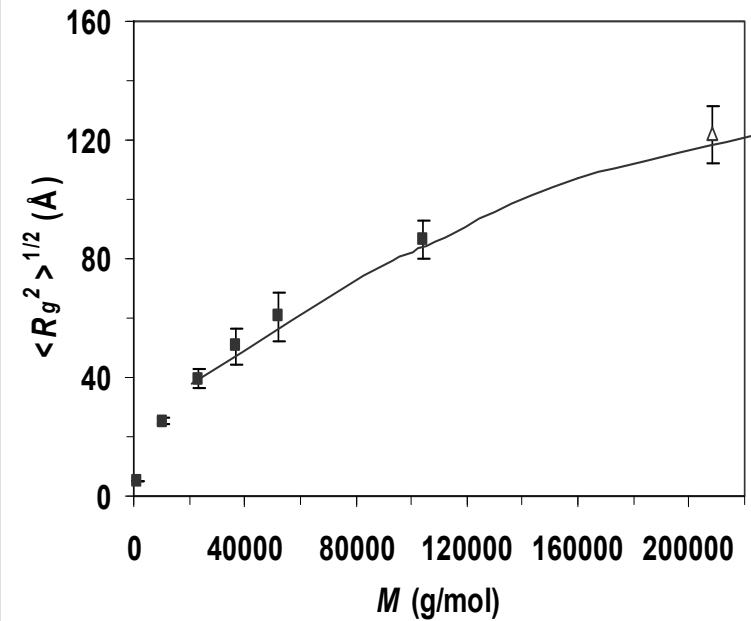
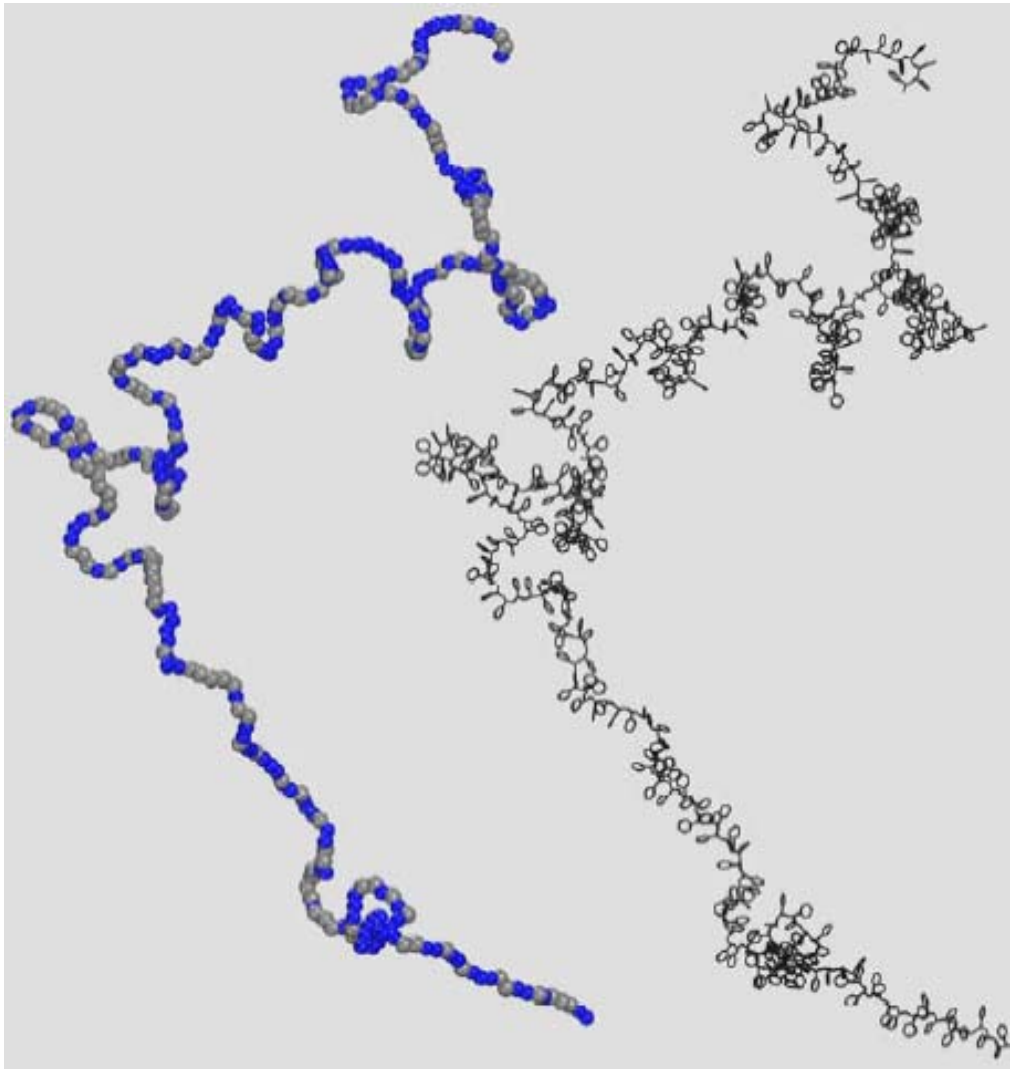
ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΙ ΜΟΝΤΕ CARLO ΜΕΤΑΒΛΗΤΗΣ ΣΥΝΔΕΤΙΚΟΤΗΤΑΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ



A. Uhlherr, M.
Doxastakis, V.G.
Mavrantzas, DNT, S.J.
Leak, N.E. Adam, P.E.
Nyberg, *Europhys. Lett.*
57, 506 (2002)



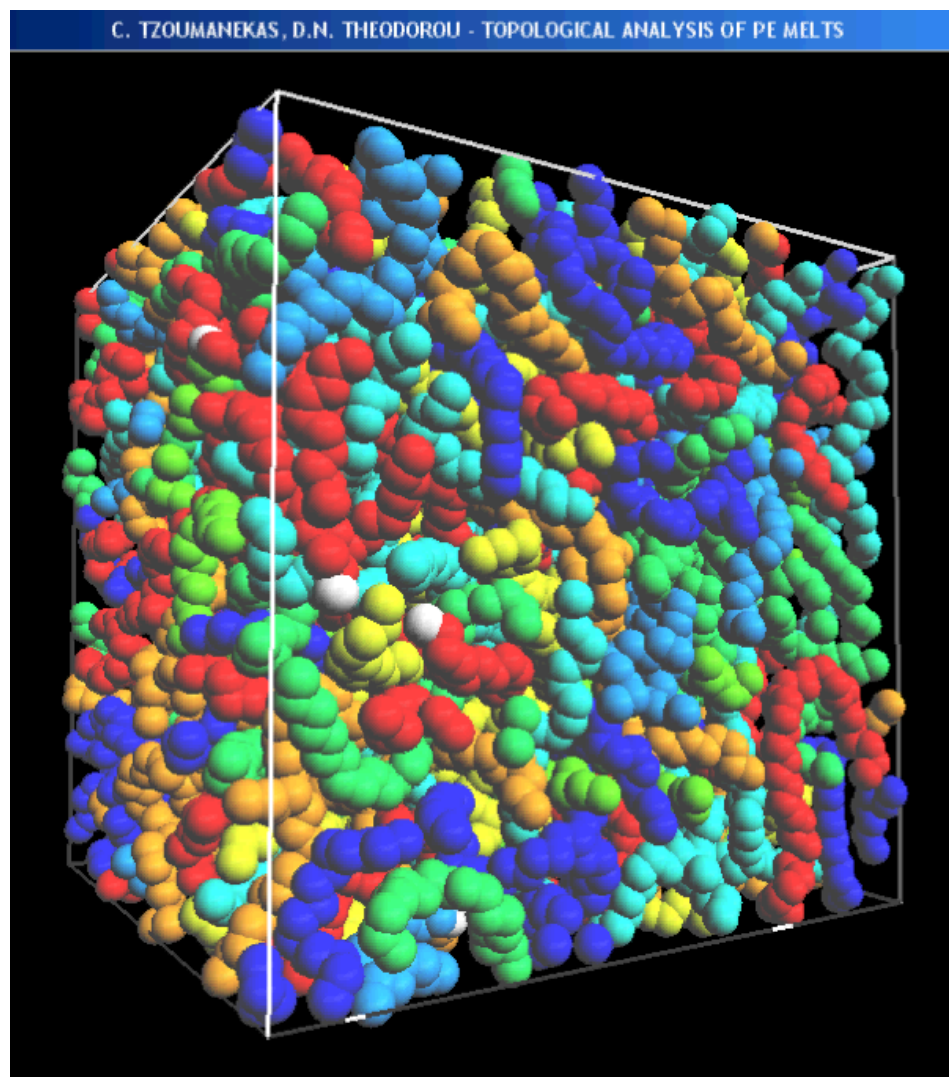
ΑΔΡΟΠΟΙΗΣΗ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΠΡΟΤΥΠΩΝ: ΑΤΑΚΤΙΚΟ ΠΟΛΥΣΤΥΡΕΝΙΟ



Γυροσκοπική ακτίνα R_g :
μέτρο της χωρικής έκτασης μιας αλυσίδας μέσα στο υλικό.
Αδροποιημένη προσομοίωση Monte Carlo (σημεία) και περίθλαση νετρονίων (γραμμή).

T. Spyriouni, C. Tzoumanekas, DNT, G. Milano, F. Müller-Plathe,
Macromolecules, **40**, 3876-3885 (2007).

ΤΟΠΟΛΟΓΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ ΜΟΡΙΑΚΩΝ ΑΠΕΙΚΟΝΙΣΕΩΝ ΚΑΙ ΑΝΑΓΩΓΗ ΤΟΥΣ ΣΕ ΔΙΚΤΥΑ ΔΙΑΠΛΟΚΩΝ



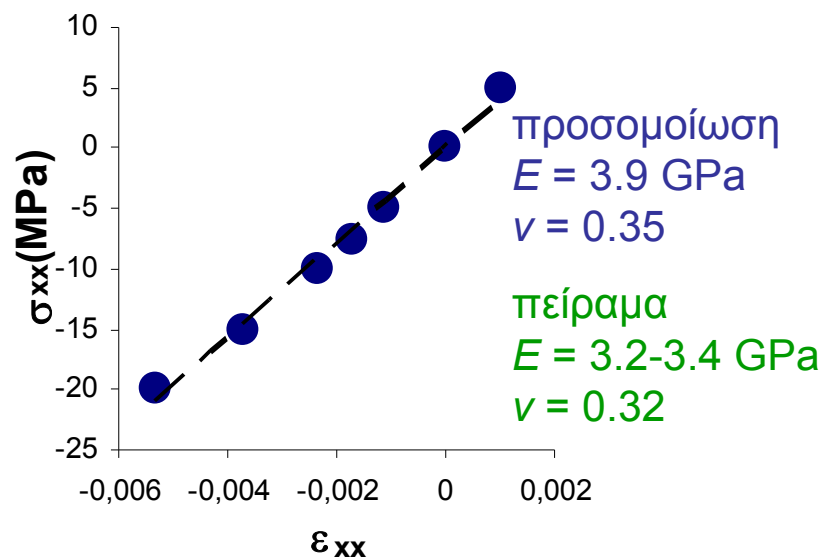
Αλγόριθμος CReTA

C. Tzoumanekas and DNT,
Macromolecules, **39**, 4592 (2006).

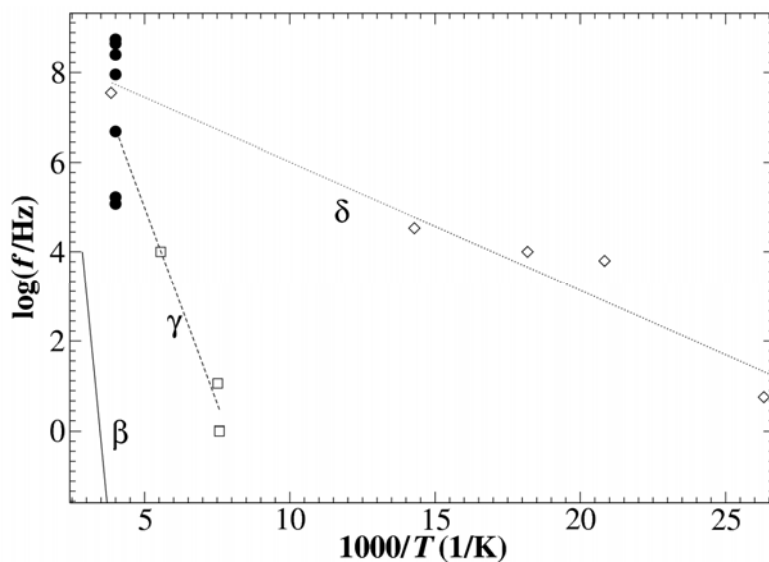
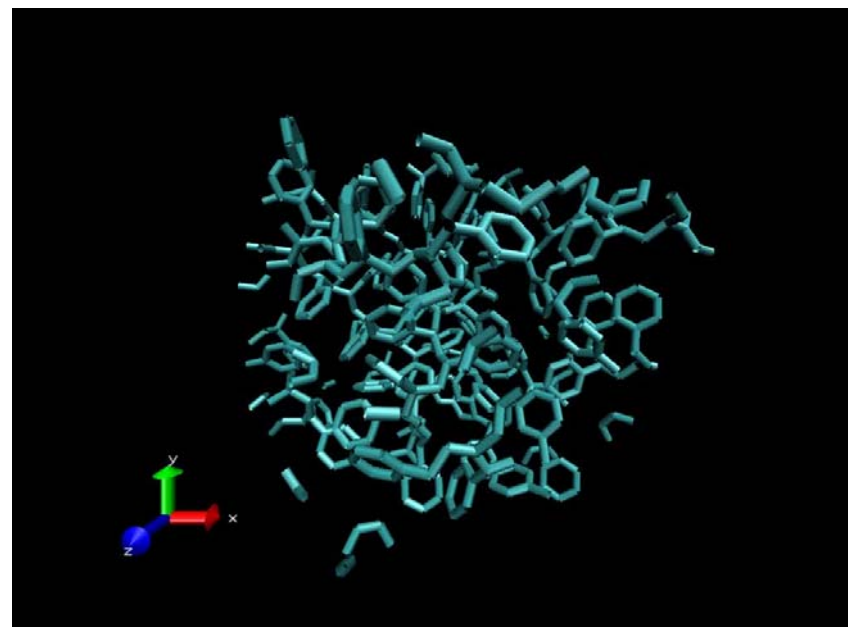
Πολυμερές	M_e (g/mol)	d (nm)
PE (450 K)	1037 (860) ^α	3.66 (3.60) ^α
PB (413 K)	2412 (2346) ^α	4.23 (4.30) ^α
PET (450 K)	1525 (1450) ^α	3.35 (3.80-3.50) ^α
aPS (500 K)	12914 (13310) ^α	7.58 (7.65) ^α

^απειραμ. (ρεολογικές μετρήσεις),
Fetters et al., *Macromolecules* **24**,
4639 (1994)

ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΗ ΓΗΡΑΝΣΗ ΥΑΛΩΔΩΝ ΠΟΛΥΜΕΡΩΝ



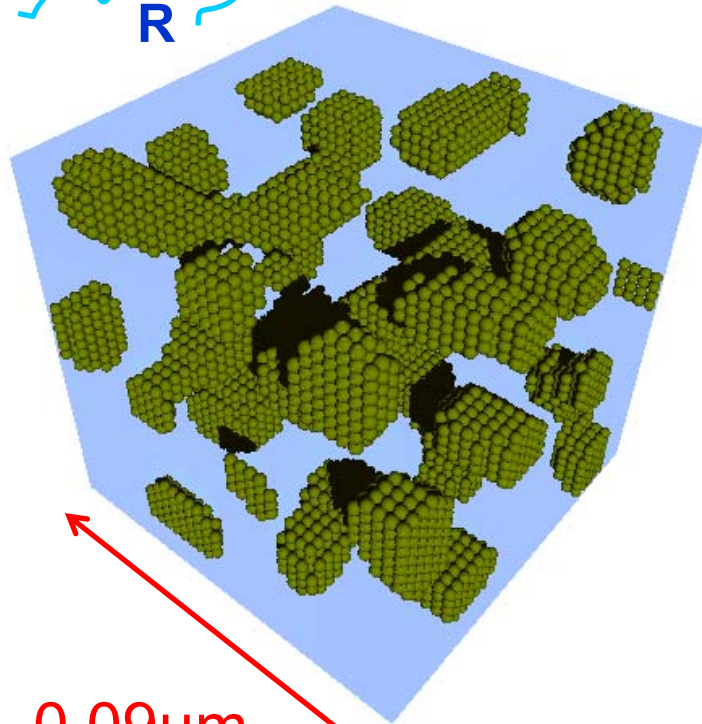
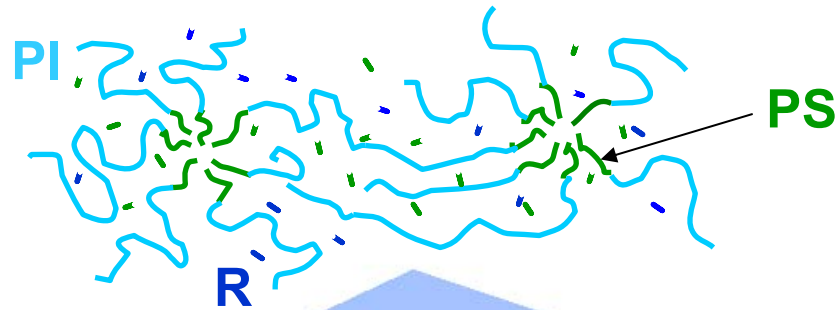
Απεικόνιση παγιδευμένη στη γειτονιά ενός τοπικού ελαχίστου της ενέργειας



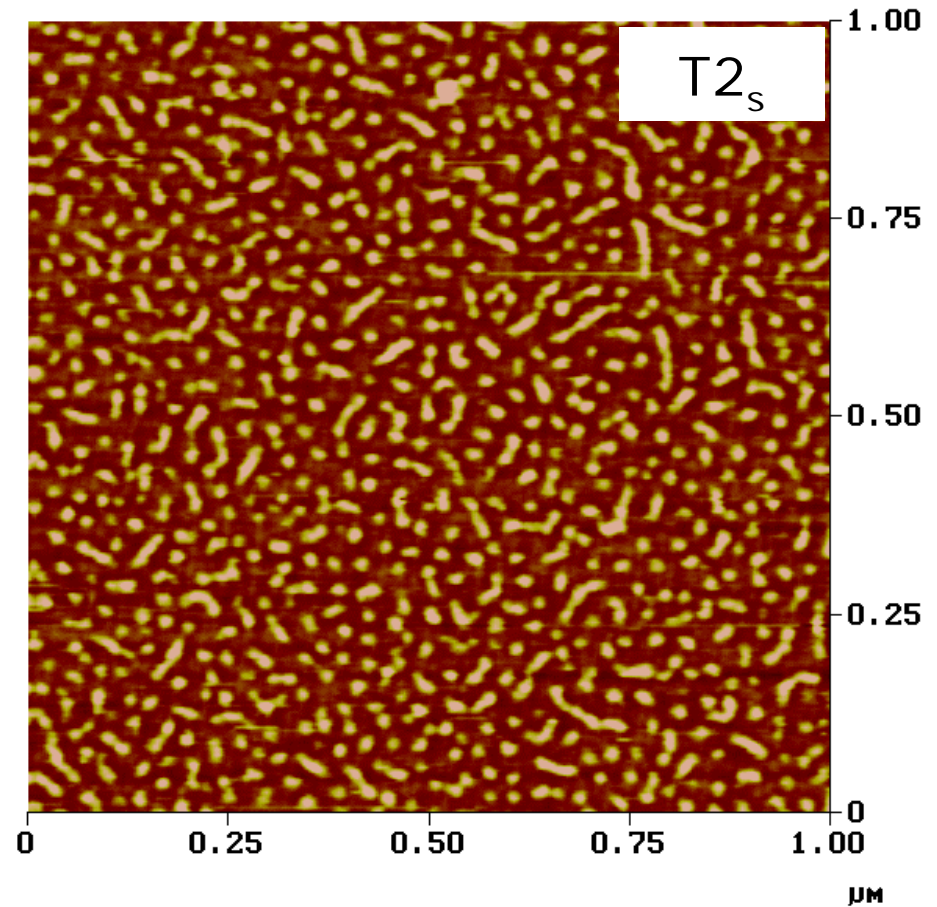
Διαδοχή σπανίων μεταβάσεων μεταξύ γειτονικών τοπικών ελαχίστων της ενέργειας

G.C. Boulougouris and DNT, *J. Chem. Phys.* **2007**, 127, 084903.

ΑΥΤΟ-ΣΥΓΚΟΛΛΗΤΙΚΑ ΥΛΙΚΑ ΑΠΟ ΑΔΡΟΜΕΡΗ ΣΥΜΠΟΛΥΜΕΡΗ ΣΤΥΡΕΝΙΟΥ

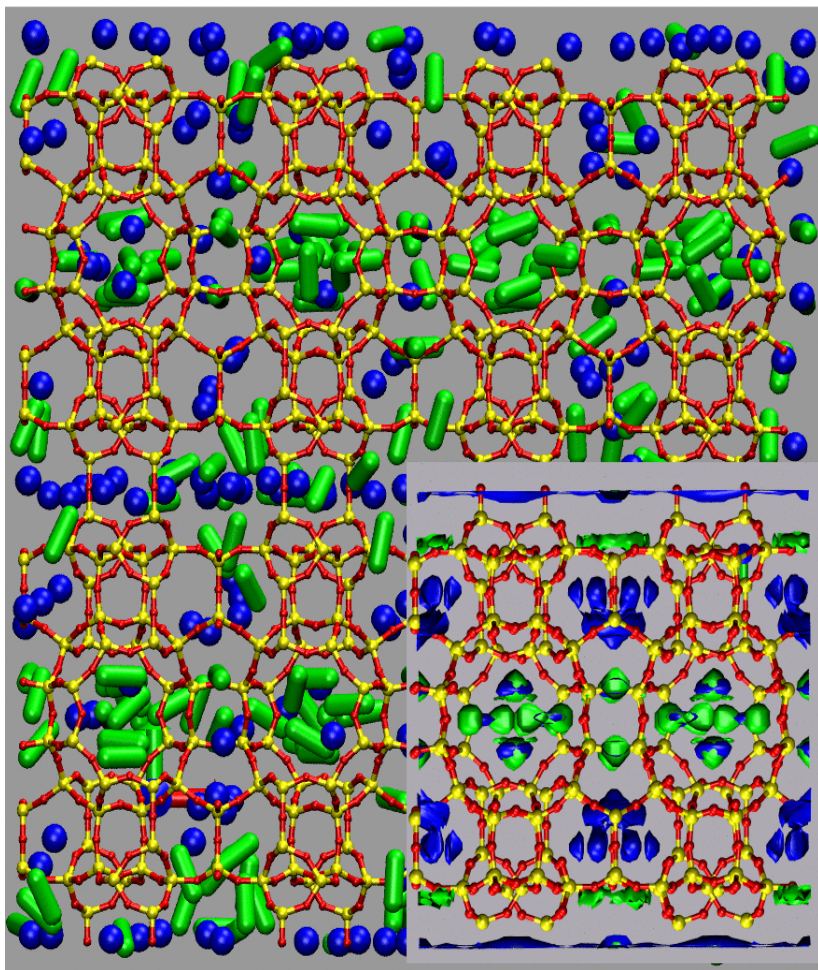


Θεωρία αυτο-συνεπούς πεδίου



Εικόνα AFM

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΡΟΦΗΣΗΣ ΚΑΙ ΔΙΑΧΥΣΗΣ ΣΕ ΖΕΟΛΙΘΟΥΣ



Μείγμα CH_4 , CO_2 στο
ζεόλιθο **ITQ-1**

7 atm, 250 K

Μοριακό κλάσμα CO_2
στην αέρια φάση = 0.10

Προσομοιώσεις Monte Carlo στο μέγα
κανονικό στατιστικό σύνολο

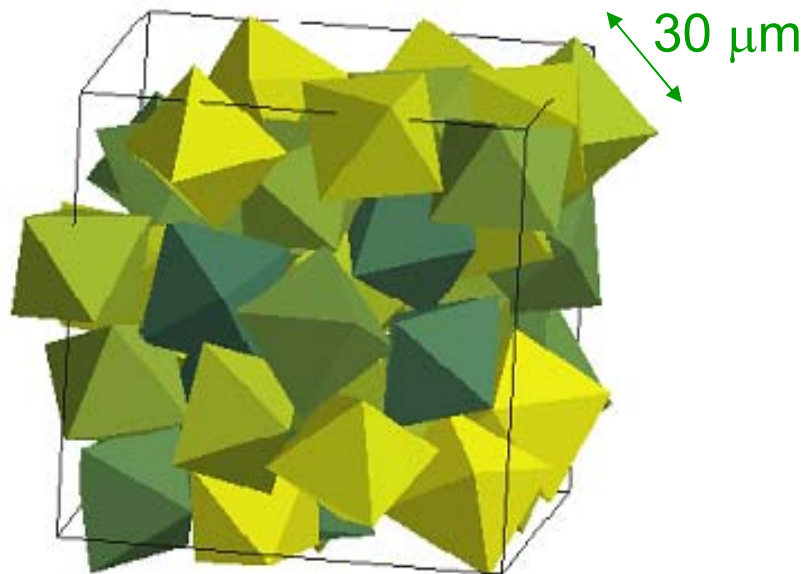
Προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής

Θεωρία Μεταβατικών Καταστάσεων

J.-M. Leyssale, G.K. Papadopoulos, D.N. Theodorou, *J. Phys. Chem. B* **110**,
22742-22753 (2006).

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΑΝΑΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΠΟΡΩΔΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

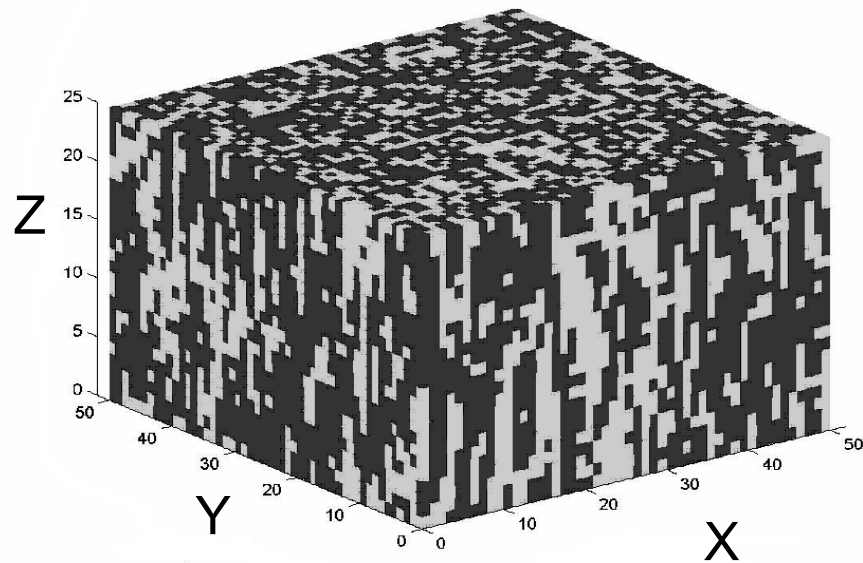
Κλίνη κρυσταλλιτών
ζεολίθου NaX



Μεθοδολογία ελαχιστοποίησης
ενέργειας

G.K. Papadopoulos, DNT, S. Vasenkov,
J. Kärger, *J.Chem.Phys.* **126**, 094702
(2007).

Ανισότροπη μεμβράνη
σιλικαλίτη-1



Monte Carlo παράλληλης
ανόπτωσης

K. Makrodimitris, G.K. Papadopoulos,
DNT *J.Chem.Phys.* **117**, 5876-5884
(2002).

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

- Τα υλικά που χρειαζόμαστε για την αντιμετώπιση των αναγκών της σύγχρονης ζωής σχεδιάζονται σε μοριακό και υπερμοριακό επίπεδο.
- Υπολογιστικές μέθοδοι ανάλυσης και προσομοίωσης, βασισμένες στις μοριακές επιστήμες και τις επιστήμες του συνεχούς, συμβάλλουν σημαντικά στην κατανόηση των σχέσεων δομής – ιδιοτήτων – επεξεργασίας – επιδόσεων.
- Πρόκληση για την υπολογιστική επιστήμη των υλικών αποτελεί το ευρύτατο φάσμα μηκών και χρόνων που διέπουν τη δομή και τη δυναμική συμπεριφορά των υλικών. Για την αντιμετώπιση αυτής της πρόκλησης αναπτύσσονται στο Ε.Μ.Π. νέες, ιεραρχικές στρατηγικές προτυποποίησης.

Η ΟΜΑΔΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗΣ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ ΣΤΟ Ε.ΜΠ.

Μεταδιδακτορικοί Ερευνητές

Γιώργος Μπουλουγούρης
Γιώργος Παπαδόπουλος
Χρίστος Τζουμανέκας
Adrien Leygue

Μεταδιδακτορικοί Συνεργάτες

Νίκη Βέργαδου, ΕΚΕΦΕ «Δ»
Εύη Παντατοσάκη, CNRS, FR
Λουκάς Περιστεράς, Scienomics
Δώρα Σπυριούνη, ΕΚΕΦΕ «Δ»

Επιστημονικός Υπεύθυνος

Δώρος Ν. Θεοδώρου

Διδακτορικοί Σπουδαστές

Στέφανος Ανωγιαννάκης
Αντωνία Βύρκου
Νίκος Λεμπέσης
Γρηγόρης Μεγαριώτης
Θανάσης Μοροζίνης
Νίκος Ρωμανός
Δημήτρης Τσαλίκης
Marco Sant

Διπλωματικοί Σπουδαστές

Χρύσανθος Κωνσταντινίδης
Μανόλης Χαλδούπης

ΕΠΙΣΚΕΠΤΕΣ ΕΡΕΥΝΗΤΕΣ 2002-2007

Dr. Maria Grazia de Angelis, U. Bologna, IT

Dr. Erik Johansson, Univ.College Borås/Chalmers U., SE

Mr. Kazunori Kamio, Mitsui Chemical, JP

Dr. Adrien Leygue, U. C. Louvain, BE (EU-NSF collab. project)

Dr. Jean-Marc Leyssale, CNRS, FR (EU Marie Curie Network)

Dr. F. Javier Ramos-Díaz, CSIC, ES (MEC fellow)

Dr. Luigi Sanguigno, U. Napoli, IT

Mr. Marco Sant, U. Padova, IT (EU Marie Curie Network)

Prof. Zbigniew Stachurski, ANU, AU (sabbatical)

Dr. Alfred Uhlherr, CSIRO, AU (ARC fellow)

Dr. Collin Wick, U. Minnesota, USA (NSF fellow)

ΑΠΟΦΟΙΤΟΙ ΟΜΑΔΑΣ 2002-2007

Βασίλης Δενδρουλάκης, διπλωματικός → διδακτορικός, M.I.T.

Γιολήτα Λογοθέτη, διδάκτορας → Hyperion S.A., Κύπρος

Κώστας Νταουλάς, μεταδιδακτορικός → U. Göttingen, DE

Λουκάς Περιστεράς, μεταδιδακτορικός → Scienomics SARL, FR

Δέσποινα Τζουλάκη, διπλωματικός → διδακτορικός, U.Leipzig, DE

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

European Commission (EU-NSF STREP “MNIBS”, Marie Curie Research Network “INDENS”, Marie Curie ERG “SIMGLASS”)

Dutch Polymer Institute, NL

ΓΓΕΤ (Προγράμματα «ΠΕΝΕΔ 2001», «ΠΕΝΕΔ 2003», «ENTER» προς Γ. Μπουλουγούρη)

ΥΠΕΠΘ (Πρόγραμμα «Πυθαγόρας Ι»)

Mitsui Chemical, JP (Κ. Kamio)

Ministerio de Educación y Ciencia, ES (J. Ramos)

National Science Foundation, USA (C. Wick)

Scienomics SARL, FR

Επιτροπή Βασικής Έρευνας ΕΜΠ (πρόγραμμα Κ. Καραθεοδωρή)

Australian Research Council, AU (A. Uhlherr)

Barcelona Supercomputing Centre, ES

SARA Supercomputer Centre, NL

Τομέας Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών, ΕΜΠ

Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ

Επιτροπή Ερευνών, ΕΜΠ