



ΕΛΙΔΕΚ.
Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας & Καινοτομίας

Περιγραφή Χρηματοδοτούμενου Ερευνητικού Έργου
1η Προκήρυξη Ερευνητικών Έργων ΕΛ.ΙΔ.Ε.Κ. για την
ενίσχυση των Μελών ΔΕΠ και Ερευνητών/τριών και την
προμήθεια ερευνητικού εξοπλισμού μεγάλης αξίας

Τίτλος Ερευνητικού Έργου: Προσομοιώσεις, σε Πολλαπλές Κλίμακες Μήκους και Χρόνου, Πολυμερών σε Διεπιφάνειες (MUSIPOLI)

Επιστημονικός Υπεύθυνος: Δώρος (Θεόδωρος) Ν. Θεοδώρου

Φιλικός προς τον αναγνώστη τίτλος:
Προσομοιώσεις, σε Πολλαπλές Κλίμακες Μήκους και Χρόνου, Πολυμερών σε Διεπιφάνειες

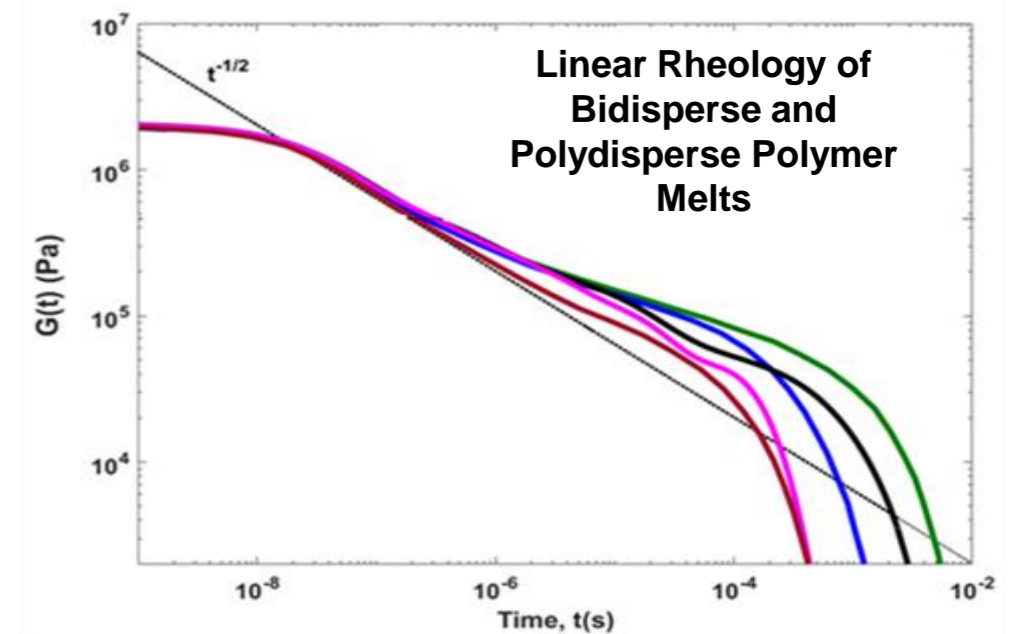
Επιστημονική Περιοχή: Επιστήμες Μηχανικού και Τεχνολογίας, Μηχανική των Υλικών

Φορέας Προέλευσης και Χώρα: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Ελλάδα

Φορέας Υποδοχής: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Συνεργαζόμενος Φορέας: Δεν υπάρχει

Ιστοσελίδα προβολής του Έργου (αν υφίσταται): <http://comse.chemeng.ntua.gr>



Ποσό Χρηματοδότησης: 188.000,00 ευρώ

Διάρκεια Χρηματοδότησης: 36 μήνες

Σύνοψη Ερευνητικού Έργου

Το παρόν έργο στοχεύει στην ανάπτυξη μεθόδων προσομοίωσης σε πολλαπλές κλίμακες μήκους και χρόνου για την πρόβλεψη δομικών, θερμοδυναμικών και ρεολογικών ιδιοτήτων πολυμερικών υλικών ευρισκομένων σε επαφή με διεπιφάνειες, όπου η εμπειρία της προτείνουσας επιστημονικής ομάδας δύναται να οδηγήσει σε σημαντικές καινοτομίες. Λεπτομερέστερα, μελετώνται υπολογιστικά ρέοντα πολυμερικά τήγματα επί στερεών υποστρωμάτων, καθώς και πολυμερικά τήγματα και ελαστομερή που περιέχουν νανοσωματίδια. Το ενδιαφέρον για τις ροές πολυμερικών τηγμάτων επί στερεών υποστρωμάτων προκύπτει από τη σπουδαιότητά τους σε σημαντικό αριθμό βιομηχανικών διεργασιών, όπως είναι η εκβολή και ο σχηματισμός υμενίων με εμφύσηση. Η αξία της υπολογιστικής ρευστοδυναμικής σε συνδυασμό με φαινομενολογικές υλικές σχέσεις για την επίλυση προβλημάτων σχεδιασμού σε αυτήν την επιστημονική περιοχή είναι αναμφισβήτητη. Μολαταύτα, υπάρχουν αναπάντητες ερωτήσεις σχετικά με τη διεπιφανειακή συμπεριφορά πολυμερικών τηγμάτων, η οποία εξαρτάται από τη «χημεία» των αλληλεπιδράσεων στερεού-πολυμερούς και απαιτεί εξέταση σε μοριακό επίπεδο. Στα πλαίσια του έργου αναπτύσσουμε μια μεσοσκοπική μέθοδο προσομοίωσης βασισμένη στη Δυναμική Brown και σε κινητική προσομοίωση Monte Carlo (BD/kMC) με χρήση ολισθαινόντων ελατηρίων, για την ενδελεχή διερεύνηση διεπιφανειακών φαινομένων που αφορούν πολυμερικά τήγματα μακριών αλυσίδων υπό ρυθμούς διάτμησης που χρησιμοποιούνται σε βιομηχανική κλίμακα. Η υπολογιστική μεθοδολογία μας περιλαμβάνει επίσης την επίλυση των εξισώσεων της θεωρίας αυτοσυνεπούς πεδίου πολυμερών σε επαφή με στερεά στις τρεις διαστάσεις κάνοντας χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (SCF-FEM). Ένα σημαντικό πλεονέκτημα της SCF-FEM, εν συγκρίσει προς άλλες μεθόδους, είναι ότι δύναται να αντιμετωπίσει πολύπλοκες γεωμετρίες χωρίς να απαιτεί μεγάλη υπολογιστική προσπάθεια.

Πρωτοτυπία του Ερευνητικού Έργου

Η επιστημονική μας ομάδα έχει αναπτύξει μια νέα μεθοδολογία για προσομοιώσεις Δυναμικής Brown/ κινητικού Monte Carlo (BD/kMC) μονοδιάσπαρτων πολυμερικών τηγμάτων, η οποία συνοδεύεται από ένα λογισμικό γραμμένο σε C++ υπό το όνομα *Engine for Mesoscopic Simulations for Polymer Networks* (EMSIPON). Το λογισμικό αυτό θα επεκταθεί σε σημαντικότερο βαθμό στο πλαίσιο του παρόντος έργου, ώστε να είναι ικανό να διεξάγει αδροποιημένες προσομοιώσεις πολυμερικών δικτύων κοντά σε διεπιφάνειες, καθώς και νανοσωματιδίων διεσπαρμένων σε αυτά. Η προσέγγισή μας είναι σχεδιασμένη έτσι ώστε να επιτρέπει μετάβαση από το ατομιστικό στο αδροποιημένο επίπεδο με έναν ελάχιστο αριθμό προσαρμόσιμων παραμέτρων. Από θερμοδυναμικής άποψης, το σύστημα περιγράφεται από μια αδροποιημένη ελεύθερη ενέργεια Helmholtz, η οποία στην περίπτωση ενός καθαρού πολυμερούς γράφεται ως άθροισμα πέντε όρων: ενός ενεργού δυναμικού «ελατηρίου» για την εντροπική ελαστικότητα· ενός ενεργού δυναμικού κάμψης που αφορά διαδοχικές τριάδες υπερatóμων· ενός όρου για τις μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις· ενός όρου που αφορά τα ολισθαίνοντα ελατήρια που αναπαριστούν τις διαπλοκές μεταξύ των πολυμερικών αλυσίδων· και τέλος ενός αντισταθμιστικού δυναμικού σχεδιασμένου ώστε να αναιρεί τυχόν διαταραχές στις διαμορφώσεις των αλυσίδων από τα ολισθαίνοντα ελατήρια. Επιπροσθέτως, οι πολύπλοκες διεπιφανειακές γεωμετρίες που προκύπτουν στα νανοςύνθετα υλικά είναι ευκολότερο να αντιμετωπιστούν μέσω της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (FEM). Έτσι, έχουμε ξεκινήσει να αναπτύσσουμε μια επαναληπτική μεθοδολογία βασισμένη στη θεωρία αυτοσυνεπούς πεδίου πολυμερών στις τρεις διαστάσεις κάνοντας χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (SCF-FEM), καθώς επίσης και το λογισμικό που την υλοποιεί, για να λύσουμε τις εξισώσεις διάχυσης του Edwards στις τρεις διαστάσεις. Εξ όσων γνωρίζουμε, αυτή είναι η πρώτη φορά που η ευρέως χρησιμοποιούμενη στη μηχανική και τη μαθηματική φυσική μέθοδος FEM εφαρμόζεται σε μοριακά προβλήματα αυτού του είδους.

Αναμενόμενα αποτελέσματα & Αντίκτυπος του Ερευνητικού Έργου

Η μέθοδος της Δυναμικής Brown/κινητικής προσομοίωσης Monte Carlo (BD/kMC) θα επεκταθεί σε διεπιφάνειες πολυμερούς/στερεού με τη βοήθεια ατομιστικών προσομοιώσεων για χαμηλά μοριακά βάρη. Οι ατομιστικές προσομοιώσεις θα παράσχουν πληροφορίες για τους μοριακούς μηχανισμούς και παραμέτρους για τις μεσοσκοπικές προσομοιώσεις και θα χρησιμοποιηθούν για έλεγχο των προβλέψεων στο αδροποιημένο επίπεδο περιγραφής. Σκοπεύουμε να μελετήσουμε πώς ρέουν τήγματα γραμμικού πολυαιθυλενίου σε επαφή με μέταλλα (π.χ., χρυσό) για διάφορες επιφανειακές τραχύτητες. Οι σταθερές ρυθμού μετάβασης των τμημάτων από την «ελεύθερη» στην «προσροφημένη» κατάσταση θα υπολογιστούν μέσω ανάλυσης επικινδυνότητας βάσει των ατομιστικών προσομοιώσεων.

Η μέθοδος BD/kMC επίσης θα επεκταθεί προς την κατεύθυνση της προσομοίωσης πολυδιάσπαρτων πολυμερικών τμημάτων και σταυροδεσμευμένων πολυμερικών δικτύων απουσία ή παρουσία διεσπαρμένων νανοσωματιδίων, τα οποία θα είναι επιφανειακώς τροποποιημένα ή χημικώς σταυροδεσμευμένα προς τις πολυμερικές αλυσίδες της μήτρας. Αυτή η επέκταση θα μας επιτρέψει να προβλέψουμε τα εξαρτώμενα από τη συχνότητα μέτρα αποθήκευσης και απωλειών, καθώς και τις καμπύλες τάσης-παραμόρφωσης νανოსύνθετων ελαστομερών, δοθέντων των μοριακών χαρακτηριστικών της μήτρας και των νανοσωματιδίων. Πληροφορίες από ατομιστικές προσομοιώσεις θα χρησιμοποιηθούν για τη σωστή παραμετροποίηση των υπό μελέτη συστημάτων στο αδροποιημένο επίπεδο αναπαράστασης.

Όσον αφορά τις προσομοιώσεις που βασίζονται στη θεωρία αυτοσυνεπούς πεδίου πολυμερών στις τρεις διαστάσεις κάνοντας χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων (SCF-FEM), ο υπολογισμός της ελεύθερης ενέργειας ως συνάρτησης της απεικόνισης των νανοσωματιδίων θα μας επιτρέψει να προβλέψουμε διαγράμματα φάσεων ισορροπίας για το σύστημα πολυμερούς-νανοσωματιδίων, στα οποία η θερμοδυναμικώς ευσταθέστερη φάση (ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας) θα υποδεικνύεται ως συνάρτηση του κλάσματος όγκου των νανοσωματιδίων. Θα μελετηθούν σφαιρικά νανοσωματίδια πυριτίας σε ατακτικό πολυστυρένιο με εμφυτευμένες αλυσίδες πολυστυρενίου και θα γίνει σύγκριση με δημοσιευμένα πειραματικά και υπολογιστικά αποτελέσματα για τέτοια συστήματα.

Η σημασία της χρηματοδότησης

Η χρηματοδότηση από το ΕΛΙΔΕΚ του ερευνητικού μας έργου είναι τεραστίας σημασίας για πολλούς λόγους. Πρώτον, η σημαντική χρονική διάρκεια του έργου (36 μήνες) καθιστά εφικτή την ολοκλήρωση μίας πολύπλοκης μεθοδολογίας σε πολλές βαθμίδες αναπαράστασης των πολυμερών, η οποία συνοδεύεται από δύο λογισμικά που θα αναπτυχθούν εξ ολοκλήρου στην ερευνητική μας ομάδα. Δεύτερον η χρηματοδότηση τριών ερευνητών (ενός υποψήφιου διδάκτορα και δύο μεταδιδακτορικών ερευνητών) παρέχει τη δυνατότητα ορθής ανάπτυξης των δύο προαναφερθέντων λογισμικών, καθώς και την εφαρμογή ενός αυστηρού πρωτοκόλλου αποσφαλμάτωσης το οποίο είναι πάντοτε απαραίτητο στην ανάπτυξη μεγάλων υπολογιστικών κωδίκων. Τρίτον, το ύψος της χρηματοδότησης παρέχει αφενός υψηλές μηνιαίες αποζημιώσεις για τους συμμετέχοντες στο ερευνητικό έργο και αφετέρου καλύπτει τα απαραίτητα έξοδα προβολής και διάχυσης των ερευνητικών αποτελεσμάτων.



ΕΛΙΔΕΚ.
Ελληνικό Ίδρυμα Έρευνας & Καινοτομίας

ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑ

Λ. Συγγρού 185 & Σάρδεων 2
ΤΚ. 17121, Νέα Σμύρνη, Ελλάδα
210 64 12 410, 420
communication@elidek.gr
www.elidek.gr