

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ ΥΨΗΛΩΝ ΑΠΟΔΟΣΕΩΝ ΚΑΙ ΑΤΟΜΙΣΤΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΠΟΛΥΜΕΡΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Δρ. Δ. Τσαλίκης

Εργαστήριο Στατιστικής Θερμοδυναμικής και
Μακρομορίων
Τμήμα Χημικών Μηχανικών
Πανεπιστήμιο Πατρών

Υπολογιστική επιστήμη υλικών

Θεώρηση ενός υλικού
σε ατομικό-μοριακό
επίπεδο



Διαχυτότητα,
ιξώδες, μηχανική
αντοχή

Χρόνος, θερμοκρασία,
πίεση ...

Εφαρμογές

Πολυμερή

Νανοσωματίδια

PE, PMMA, P3HT

Νανოსύνθετα

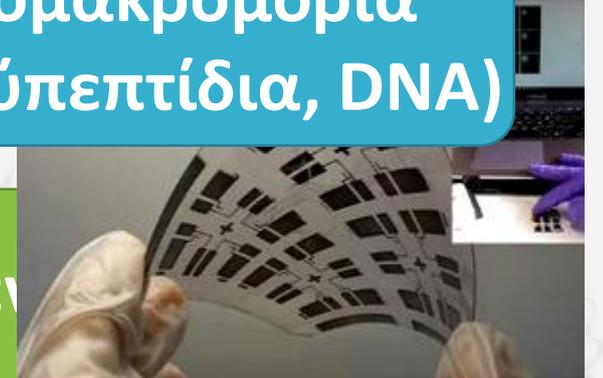
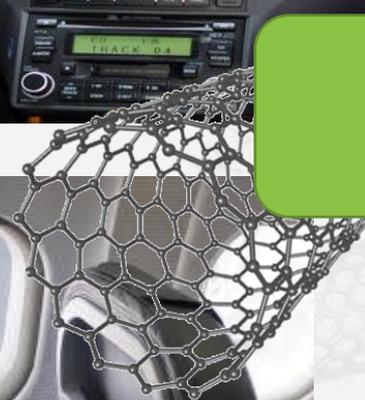
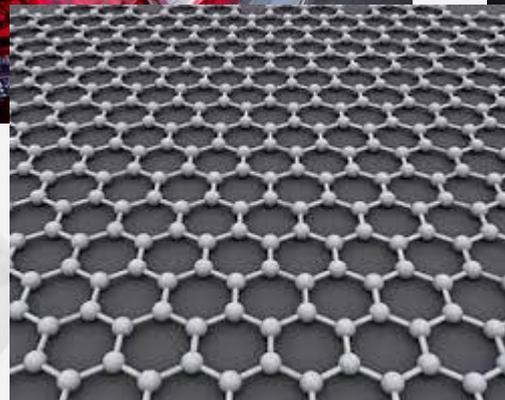
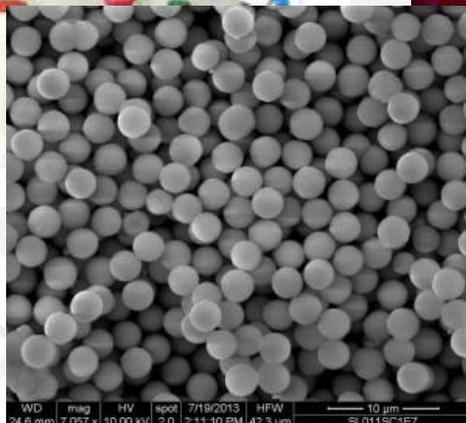
Πολυαιθέρες

Αυτοκινητικά

Πολυθιολοφάνια

Βιομακρομόρια
(πολύπεπτίδια, DNA)

Υμένια



Ερευνητικές δραστηριότητες

H2020 project
Academia:
Fraunhofer, ETH-Z, UPatras
Industry:
DOW, Unilever, IBM,
Megara Resins etc
Total Budget: ~5.4 Μ€

ΓΓΕΤ (ΕΒΔΜ34)
«Υποστήριξη ερευνητών
με έμφαση στους νέους
ερευνητές»

Κυκλικά
Πολυμερή και
DNA

Πολυμερικά
Νανοσύνθετα

Ημιαγώγιμα
Πολυμερή

Ατμοσφαιρικά
νανοσωματίδια

Formulations

Πολύ-
ηλεκτρολύτες

ΕΛΙΔΕΚ
Υποτροφίες Υποψηφίων
Διδακτόρων

H2020 project
Academia:
IPF Dresden, TU Eindhoven,
UCambridge etc
Industry:
BASF SE, AkzoNobel, URGO
Total Budget: ~2.8 Μ€

Κυκλικά Πολυμερή και DNA

Αδυναμία εφαρμογής θεωριών

- Οι μοριακές θεωρίες στη μηχανισμούς χαλάρωσης
- Ανάγκη για νέες ιδέες

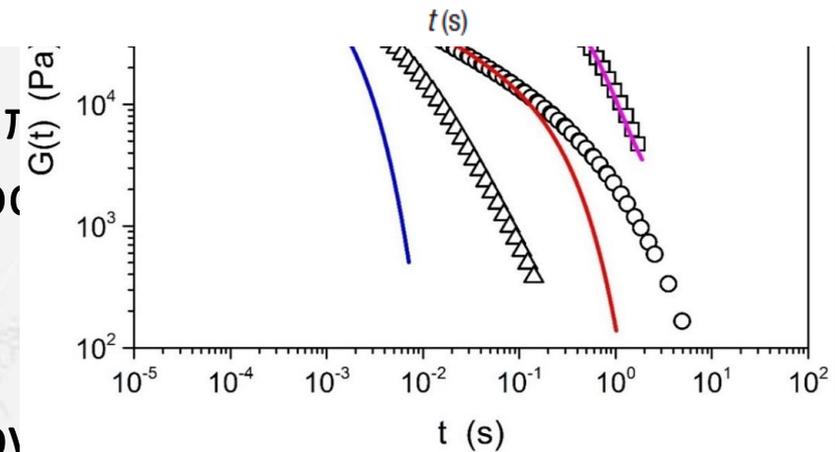
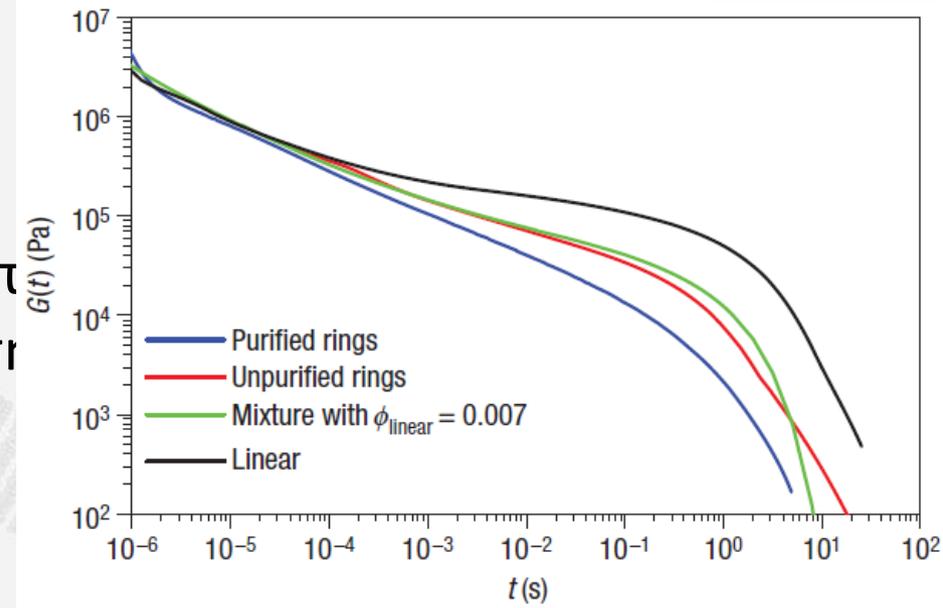
Κίνητρο

Δυσκολία στη σύνθεση

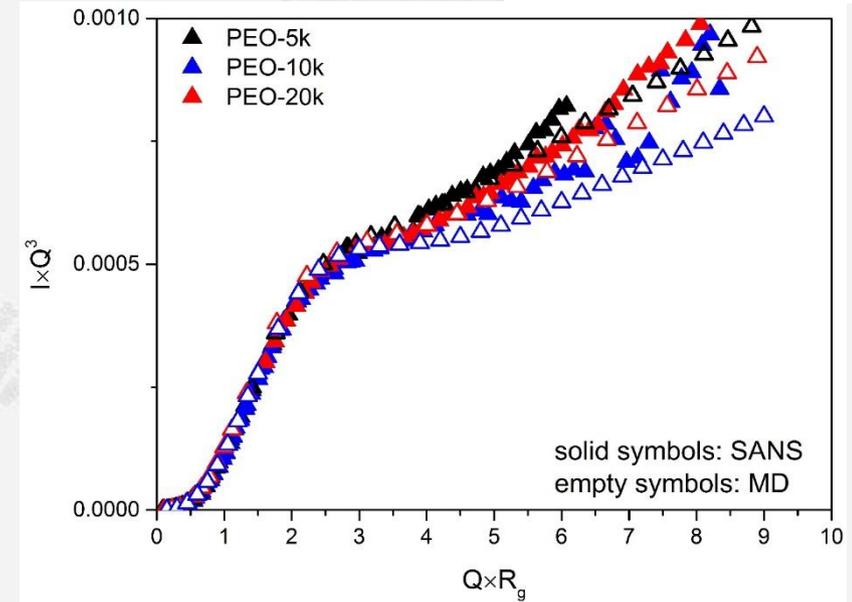
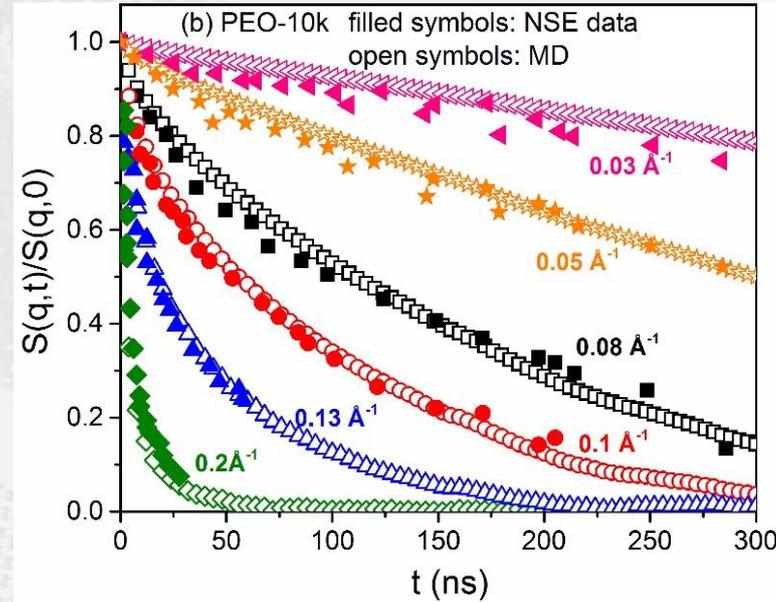
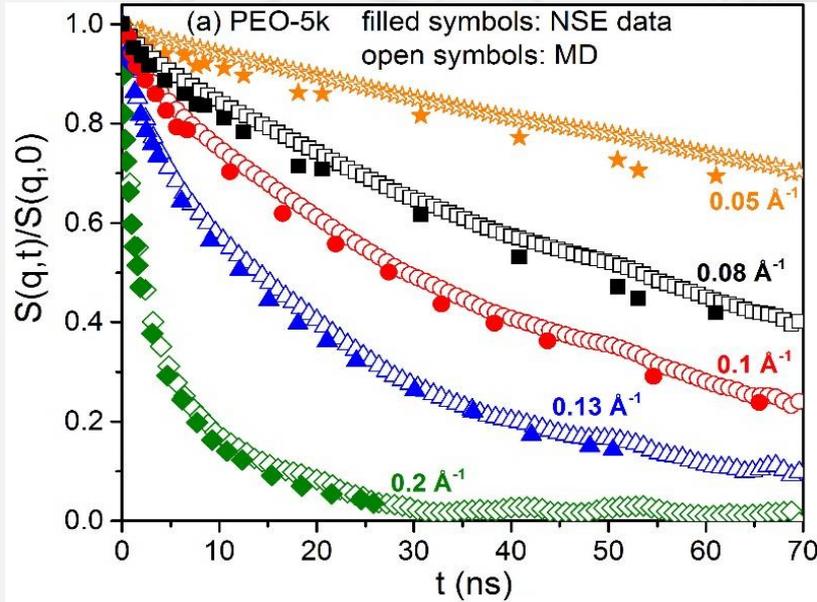
- Σύνθεση μικρών τ
- Μόλυνση από γραμμικές αλυσίδες

Κυκλικά βιοπολυμερή

- Μετέχουν σε σύνθετες διεργασίες (πχ αντιγραφή DNA)
- Φαρμακευτικές εφαρμογές



Κυκλικά Πολυμερή και DNA



NSE Spectrometer, Oak Ridge, USA

Tsalikis et al. Macromolecules, 2017

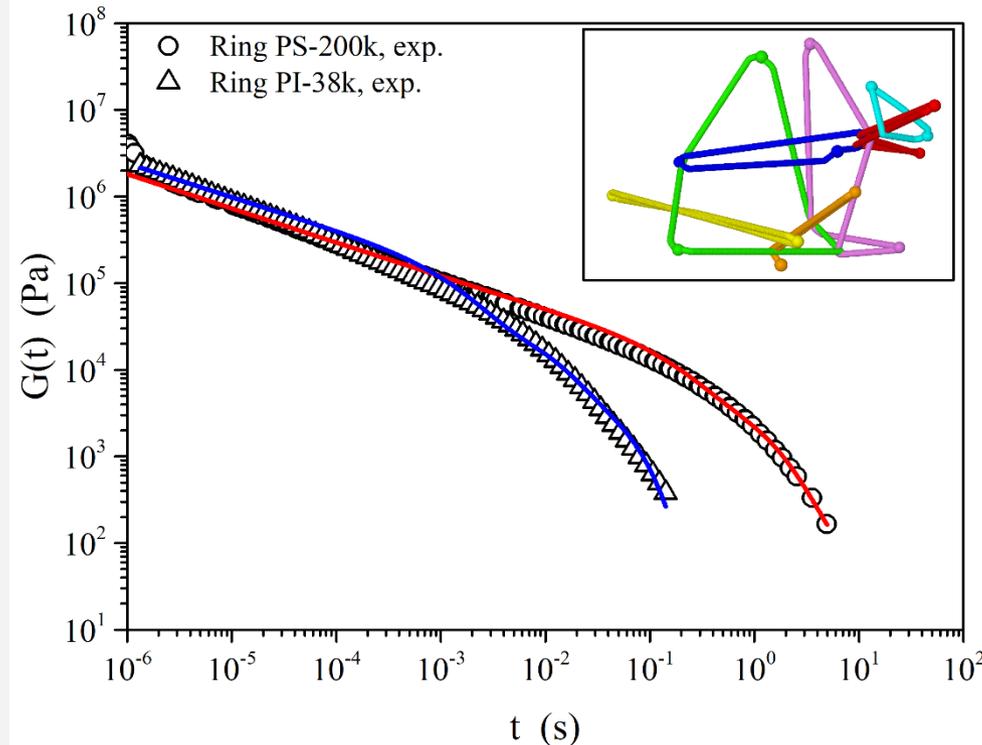
Υποδομές NSE

- Ευρώπη: Γερμανία (2), Γαλλία (2), Αγγλία, Ρωσία, Ελβετία
- ΗΠΑ (4)
- Αυστραλία
- Ασία: Ιαπωνία, Κορέα



ESS: Building cost ~1.8 B€. Delivered in 2023 (Lund, Sweden)

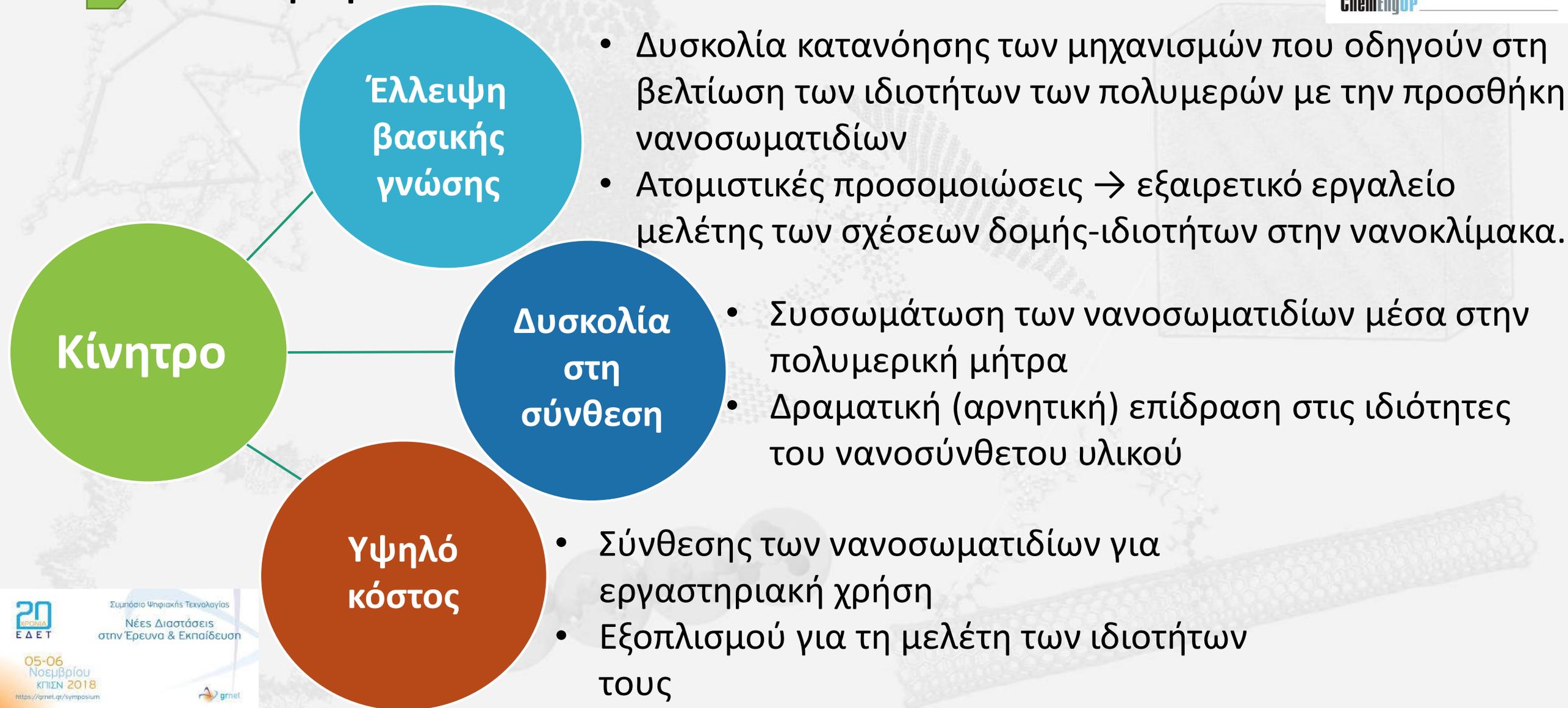
Κυκλικά Πολυμερή και DNA



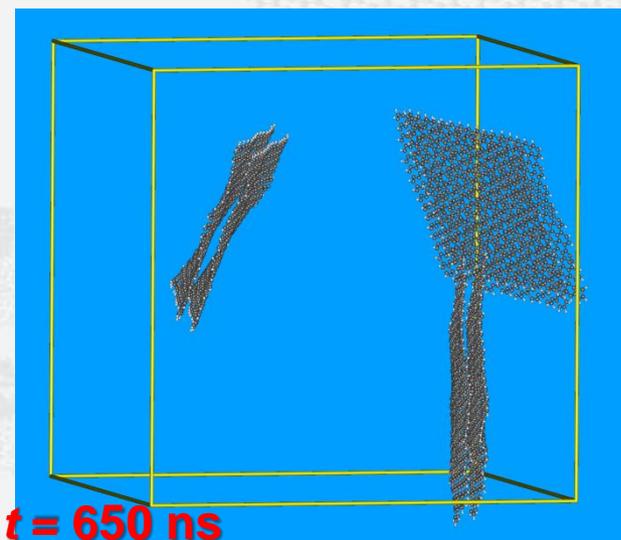
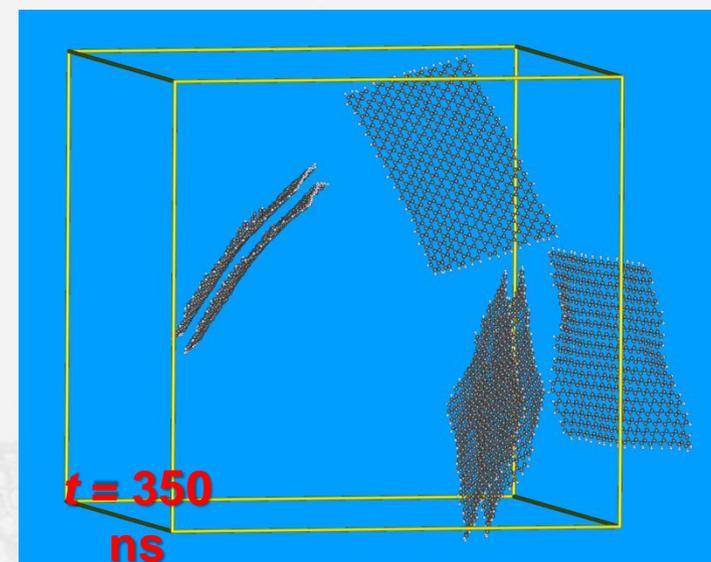
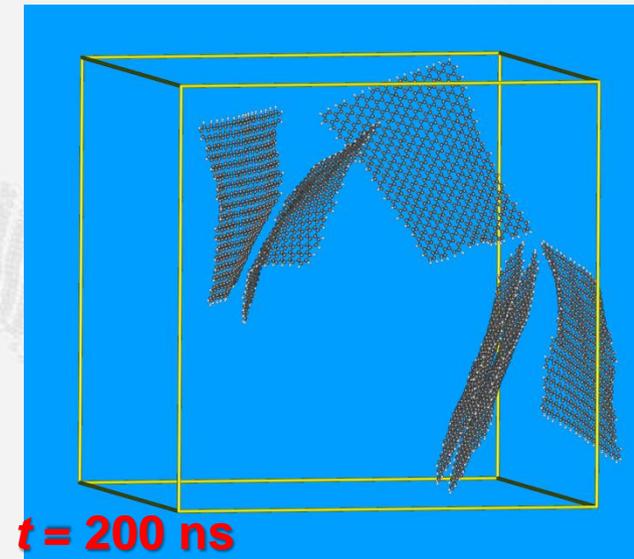
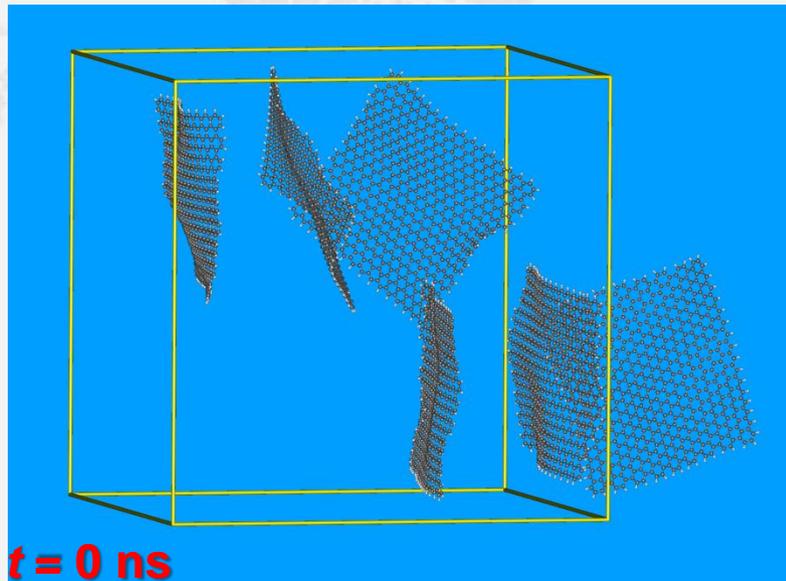
$$G t = G_N^0 \left(\frac{t}{\tau_e} \right)^{-\frac{2}{5}} \exp \left(-\frac{t}{\tau_{Ring}} \right) + G_{N,RR} \sum_{p:odd} \frac{8}{p^2 \pi^2} \exp \left(-\frac{p^2 t}{\tau_{d,RR}} \right) + G_{N,RL} \sum_{p:odd} \frac{8}{p^2 \pi^2} \exp \left(-\frac{p^2 t}{\tau_{d,RL}} \right)$$

Tsalikis et al. ACS Macro Letters, 2016

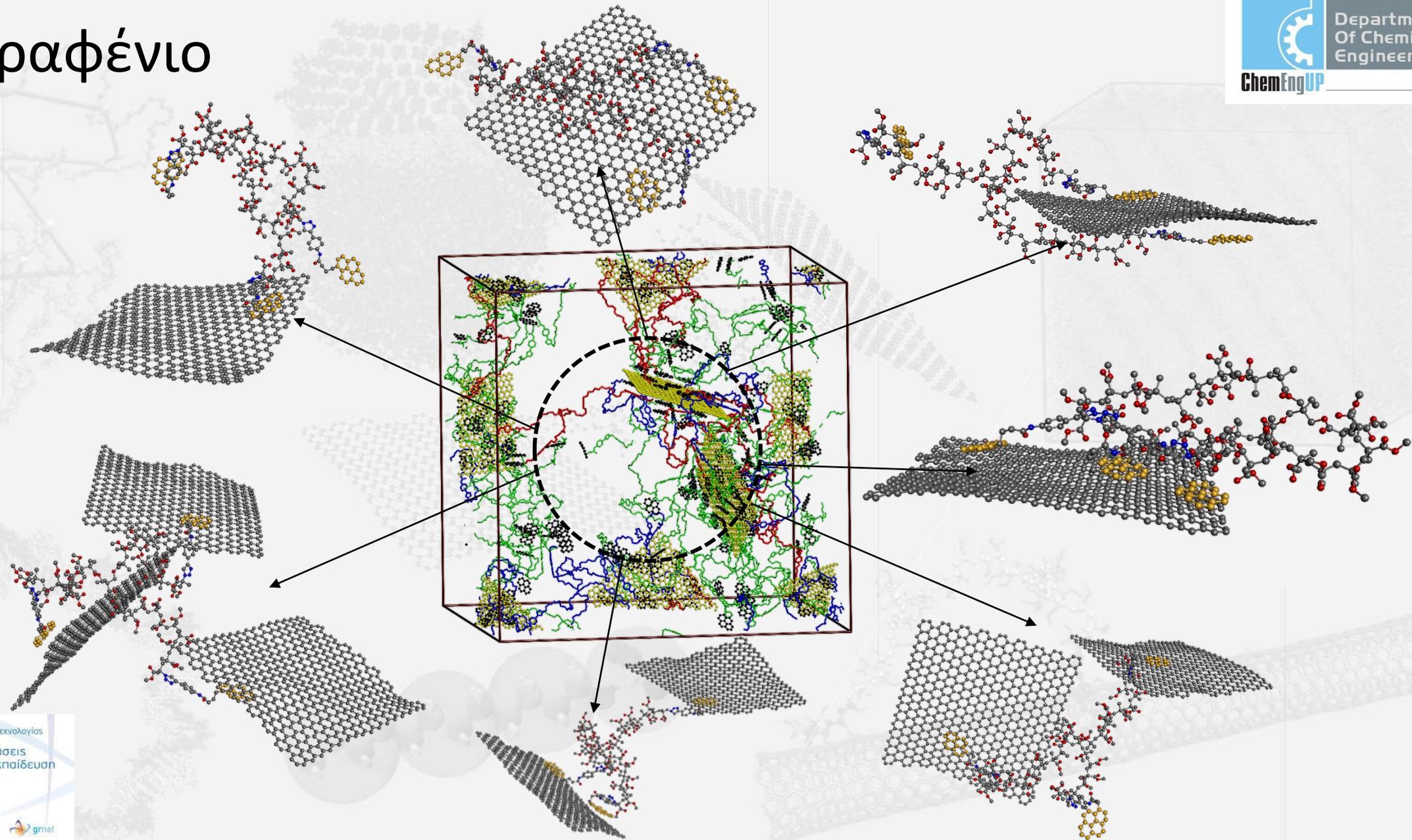
► Πολυμερικά Νανοσύνθετα



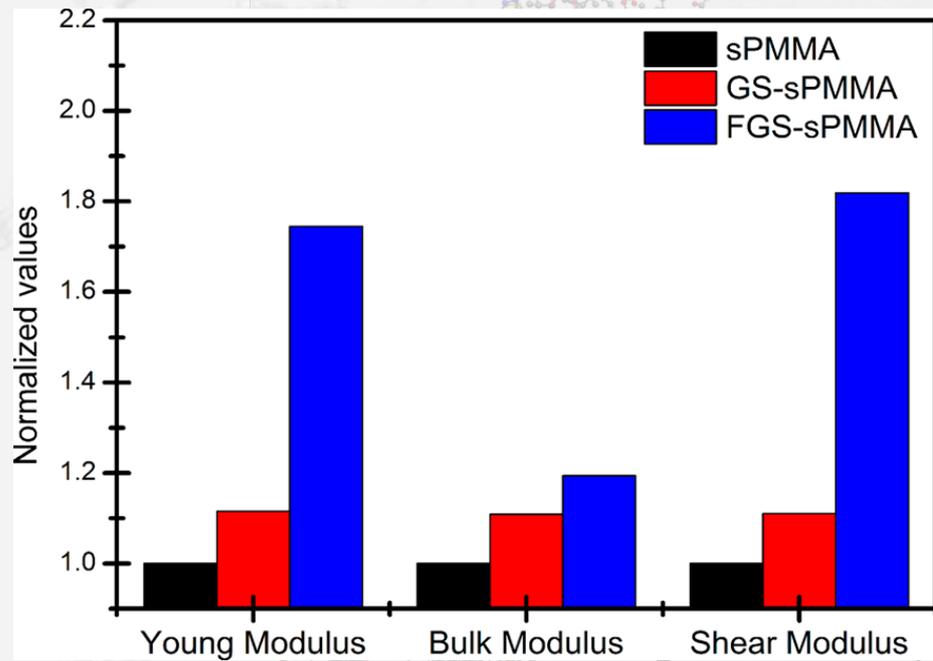
▶ Γραφένιο



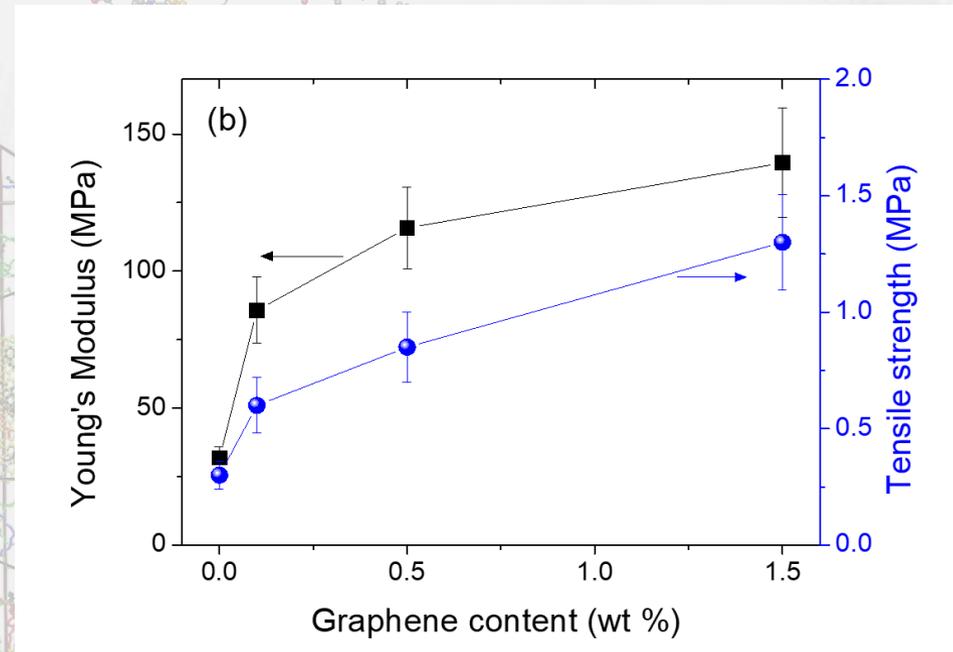
▶ Γραφένιο



Γραφένιο



Skountzos et al. J. Macromolecules, 2014



Gerpoura et al. J. Nanoscale, 2018

▶ Ατμοσφαιρικά νανοσωματίδια

Μορφολογία
& κατάσταση
φάσης
αερολυμάτων

- Κατανόηση τρόπου συμμετοχής των οργανικών ενώσεων στις ετερογενείς χημικές αντιδράσεις
- Διάρκεια ζωής τους στη σωματιδιακή φάση λόγω της οξείδωσης

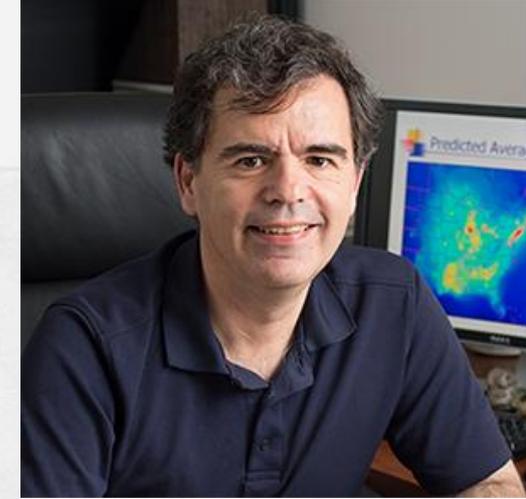
Κίνητρο

Πολυπλο-
κότητα

- < 10 % των οργανικών ενώσεων που υπάρχουν στο ατμοσφαιρικό αεροζόλ έχουν ταυτοποιηθεί ως τώρα
- Σημαντικός αριθμός ατμοσφαιρικών διεργασιών

Δυσκολία στη
μελέτη τους
πειραματικά

- Δυσχέρεια μετρήσεων σε επίπεδο νανοκλίμακας
- Πιθανή επίδραση εργαστηριακών συνθηκών στη μορφολογία των σωματιδίων
- Υψηλό κόστος εργαστηριακού εξοπλισμού



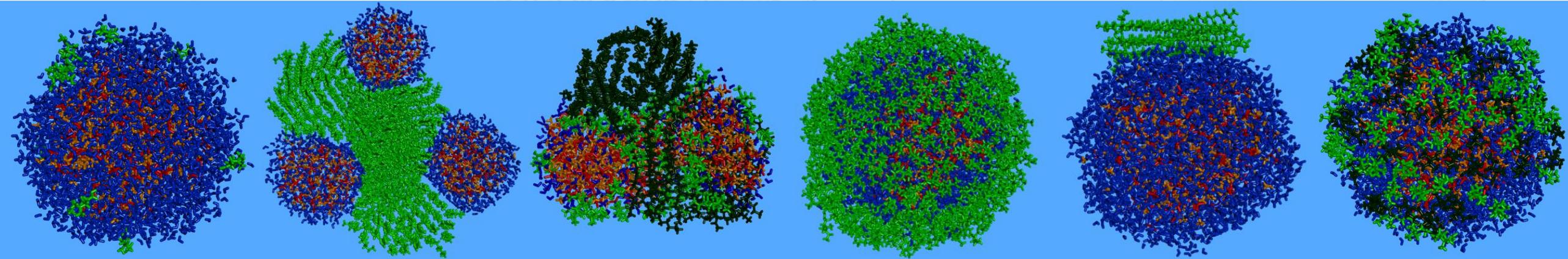
Καθ. Σ. Πανδής

Πανεπιστήμιο Πατρών

Carnegie Mellon University (USA)

▶ Ατμοσφαιρικά νανοσωματίδια

- Παρακολούθηση τρόπου σχηματισμού νανοσωματιδίων πολλών συστατικών
- Εξαγωγή φυσικοχημικών ιδιοτήτων, αλληλεπιδράσεις μεταξύ των συστατικών, κατάσταση φάσης κ.α.
- Βελτίωση μοντέλων ατμοσφαιρικής χημείας μεγάλης κλίμακας (πρόβλεψη & λήψη μέτρων μείωσης της ατμοσφαιρικής ρύπανσης)
- Εξάρτηση μορφολογίας από την υγρασία, τη χημική σύσταση & την ταυτότητα των οργανικών μορίων
- Διαχωρισμός φάσεων, ανομοιογένεια & όχι καλή ανάμειξη μεταξύ των συστατικών (*διαφοροποίηση από υπόθεση σε αρκετά μοντέλα ατμοσφαιρικής χημείας*)
- Αυξημένη συγκέντρωση οργανικών συστατικών στην επιφάνεια (πιθανή οξείδωση & συνεπώς μείωση χρόνου ζωής στην ατμόσφαιρα)



οργανικό συστατικό 1

οργανικό συστατικό 2

θειικά ανιόντα

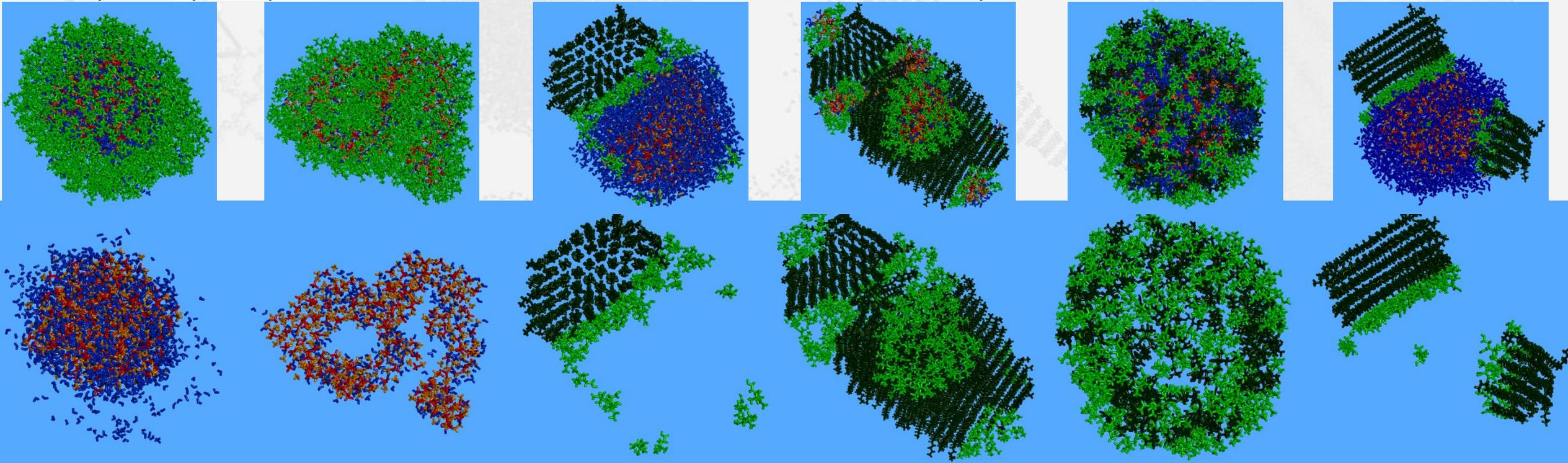
κατιόντα αμμωνίου

νερό

▶ Ατμοσφαιρικά νανοσωματίδια

Ομοιόμορφη κατανομή ανόργανων συστατικών εντός των σωματιδίων είτε σχηματισμός εσωτερικών εγκλεισμών

- Διαχωρισμός μεταξύ των οργανικών συστατικών (αυξημένη έκθεση σε οξειδωτικούς παράγοντες για το συστατικό κοντά στην επιφάνεια, 'προστασία' των υπόλοιπων)



οργανικό συστατικό 1

οργανικό συστατικό 2

θειικά ανιόντα

κατιόντα αμμωνίου

νερό

Karadima et al. submitted to ACP, 2018

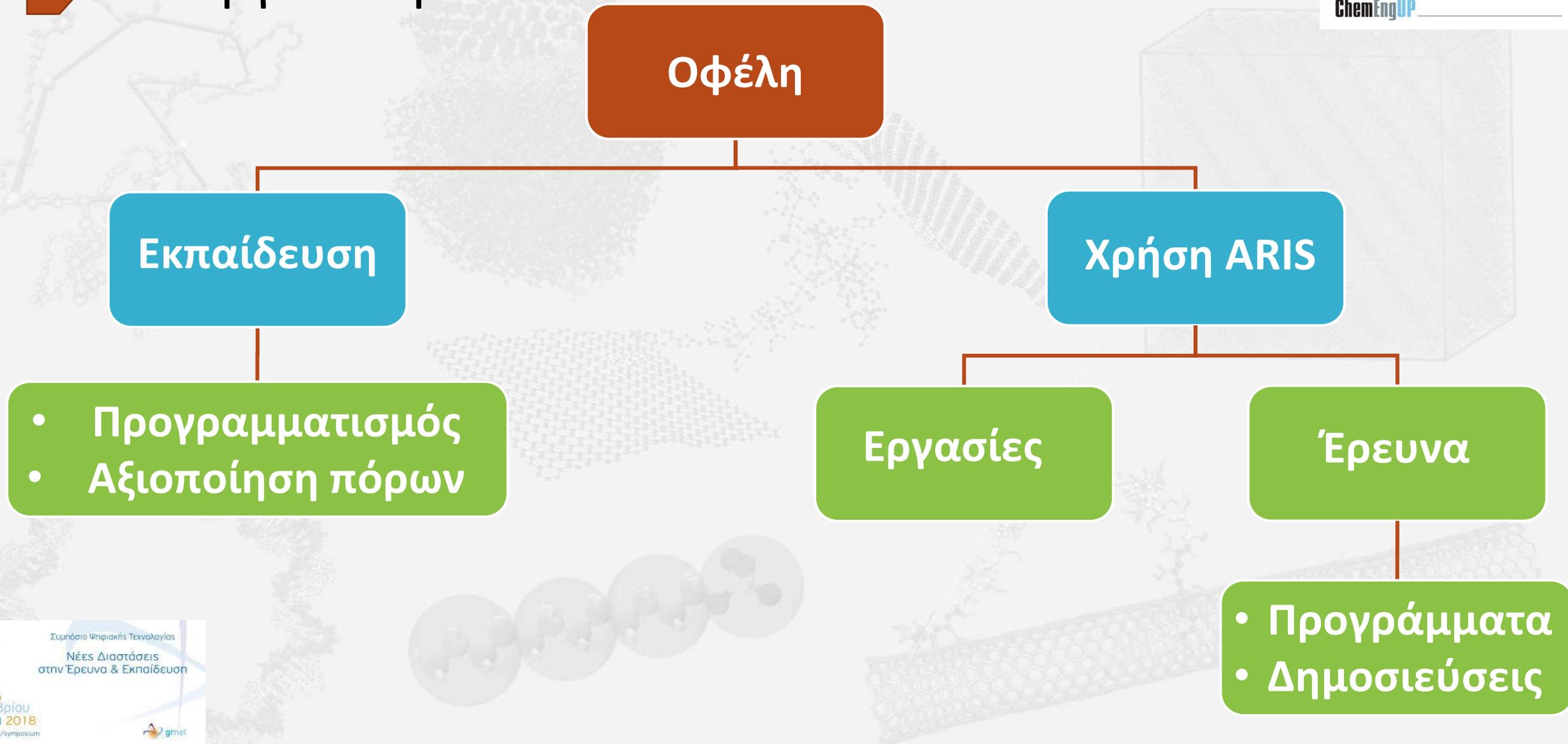
Εισαγωγή

Έρευνα

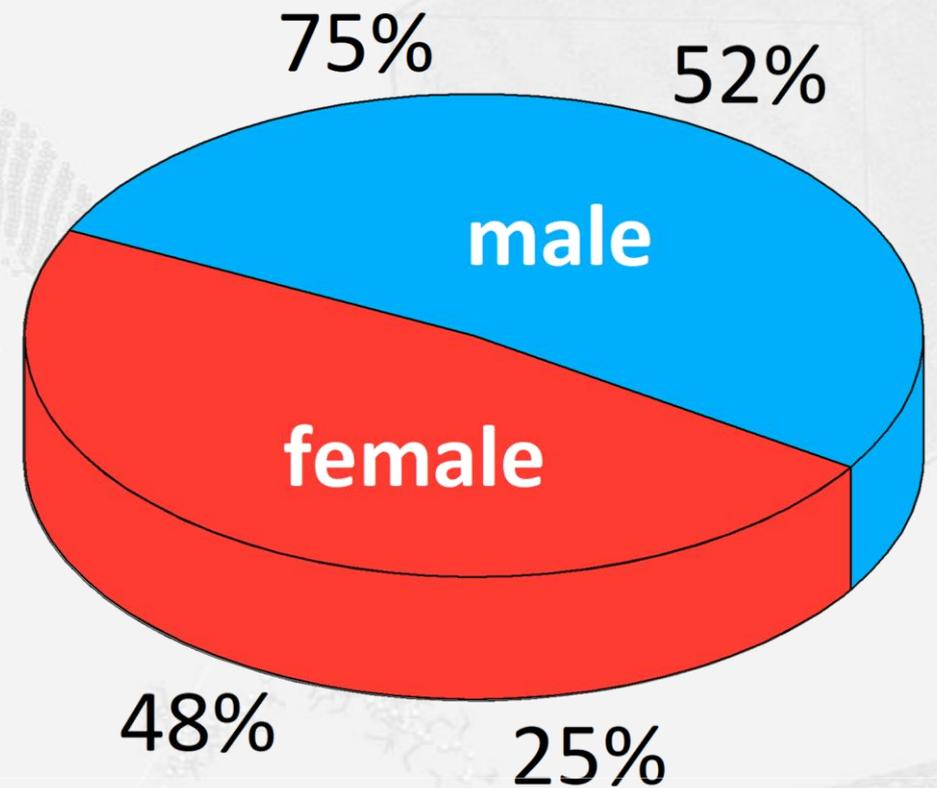
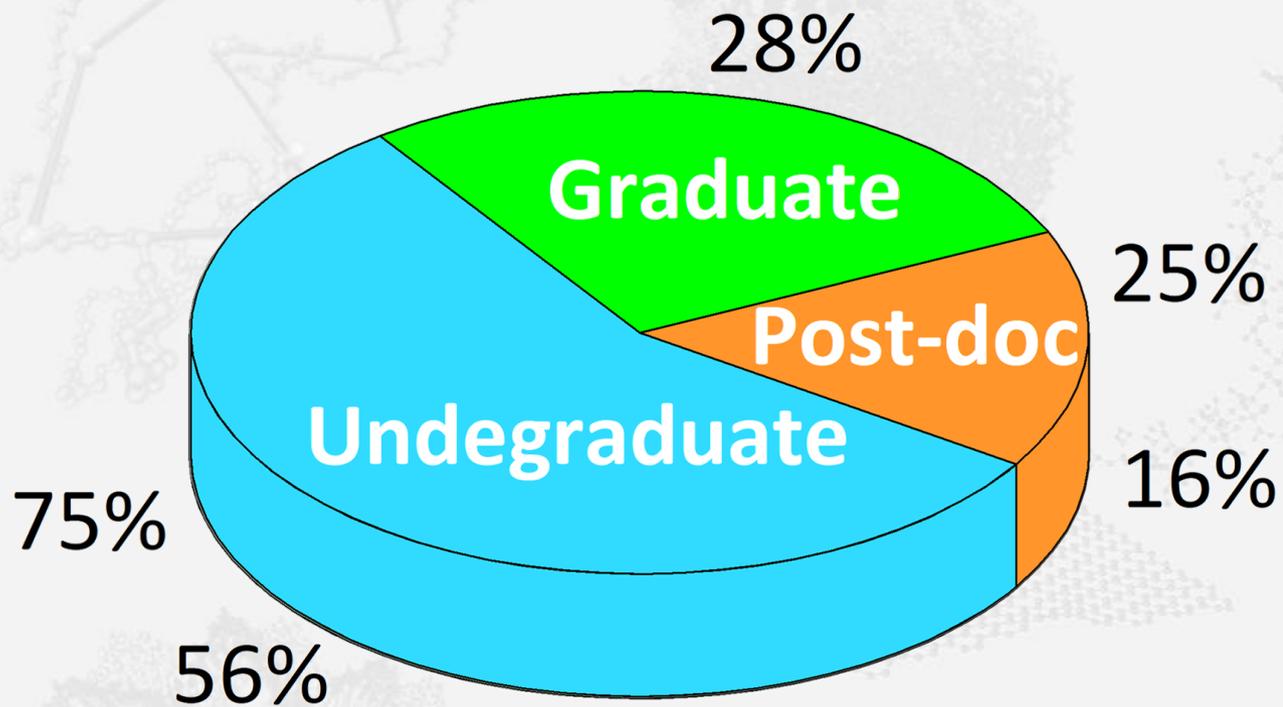
ΕΔΕΤ

Αριστεία

► Συνεργασία με ΕΔΕΤ



► Οφέλη: Στατιστικά στοιχεία



► Οφέλη: Στατιστικά στοιχεία

Οφέλη

Δημοσιεύσεις/
Παρουσιάσεις

Εργασίες

Άρθρα: 10
Παρουσιάσεις: >40

Διπλωματικές: 11
Μεταπτυχιακές: 1
Διδακτορικές: 4

Εισαγωγή

Έρευνα

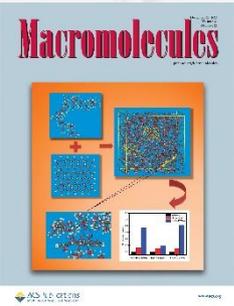
ΕΔΕΤ

Αριστεία

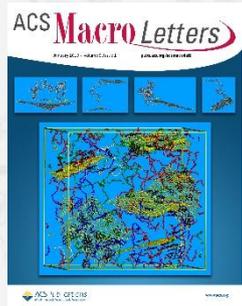
► Βραβεία-Διακρίσεις-Υποτροφίες

Δημοσιεύσεις

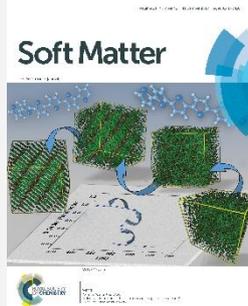
Παρουσιάσεις



2014



2016



2018



- 2016: D. Tsalikis et al. Best Poster Award in WPG2, Patras
- 2016: P. Alatas et al. 2nd Best Poster Award in HPSC, Heraklion
- 2017: A. Spyrogianni et al. 1st Best PTF Student Award, AIChE Annual Meeting, Mineapolis, USA
- 2017: D. Tsalikis et al. Top 3 Posters PRACEdays 2017, Barcelona, Spain
- 2018: T. Alexiou et al. 2nd Best Poster Award in HPSC, Ioannina

Υποτροφίες

- 2016: ΕΛΙΔΕΚ: Υποτροφίες Υπ. Διδασκτόρων E.N. Skountzos, P. Alatas, F. Tsourtu
- 2018: ΓΓΕΤ, ΕΒΔΜ34 «Νέοι Ερευνητές» Dr. T. Alexiou, Dr. Tsalikis, P. Alatas



Εισαγωγή

Έρευνα

ΕΔΕΤ

Αριστεία

LSTM Group



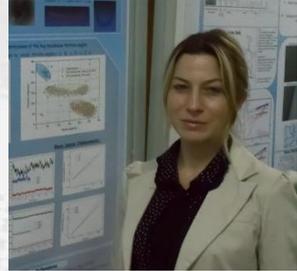
Ημιαγώγιμα
Πολυμερή

Ατμοσφαιρικά
νανοσωματίδια

Κυκλικά
Πολυμερή και
DNA

Director : Prof. Vlasis Mavrantzas

Formulations

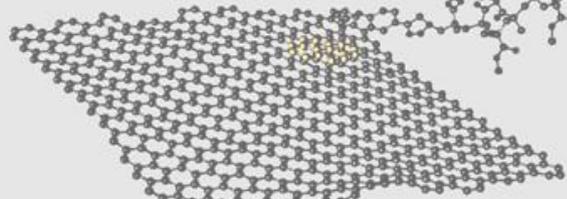
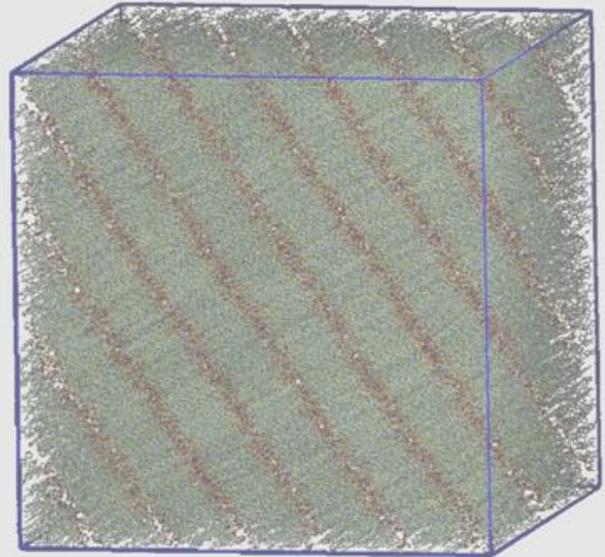
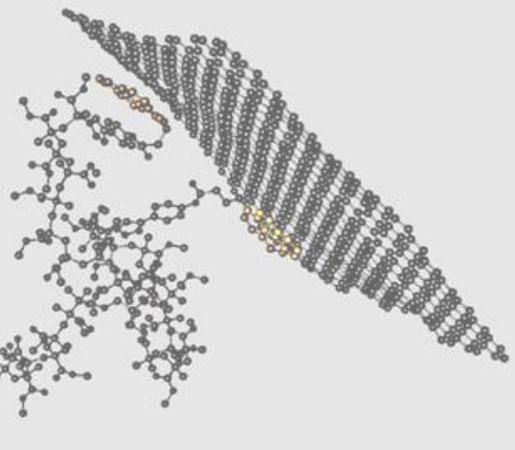
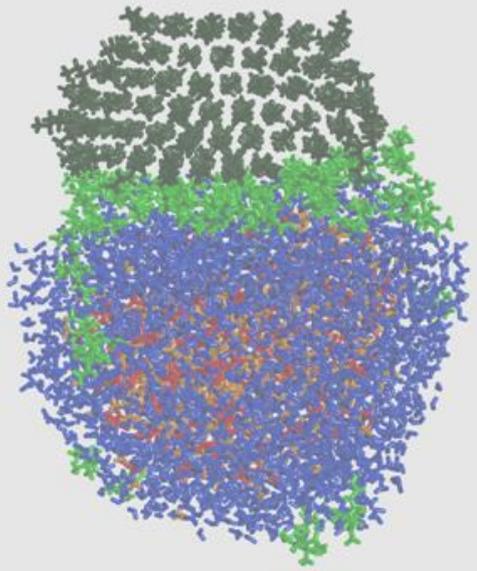
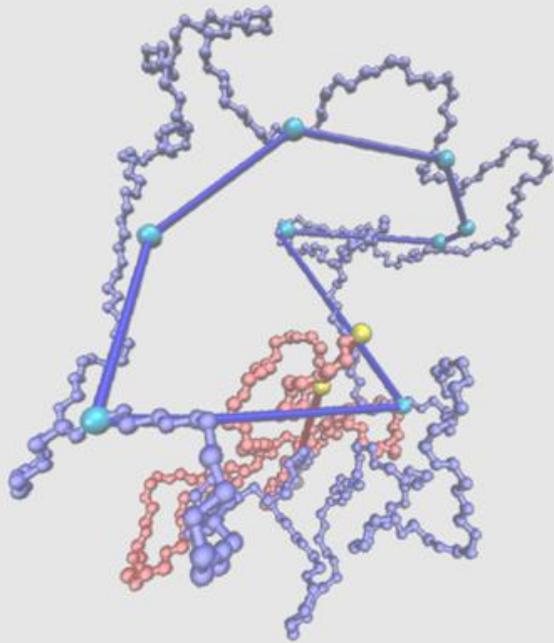
 Dr. D. Tsalikis	 Dr. T. Alexiou	 Dr. S. Peroukidis	 Dr. K. Karadima	
 P. Alatas	 P. Mermigkis	 E. N. Skountzos	 F. Tsourtou	 D. Mintis

Πολυμερικά
Νανοσύνθετα

Πολύ-
ηλεκτρολύτες



ΣΑΣ ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ!



ΣΑΣ ΕΥΧΑΡΙΣΤΩ!

