


 ΤΗΣ ΜΑΡΝΥΣ  
ΠΑΠΑΜΑΤΘΑΙΟΥ

# Δώρα Θεοδώρου

Η Ομάδα Υπολογιστικής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών αναπτύσσει νέες υπολογιστικές μεθόδους για τον ορθολογικό σχεδιασμό νέων υλικών σε συνεργασία με τη διεθνή βιομηχανία

Στη σύγχρονη ζωή έχουμε ανάγκη από υλικά με βελτιωμένες ιδιότητες, εξοικονόμηση ενέργειας και ελάχιστο αποτύπωμα στο περιβάλλον, λέει στα «NEA» ο καθηγητής του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, Δώρας Θεοδώρου. Για παράδειγμα, εξηγεί, χρειαζόμαστε ισχυρότερα και ελαφρότερα υλικά για τις ατράκτους αεροπλάνων, ελαστικά αυτοκινήτων που να συνδυάζουν χαμηλή τριβή καθώς κυλούν στο οδόστρωμα και αντοχή στη φθορά, μεμβράνες διαχωρισμού με υψηλή διαπερατότητα και εκλεκτικότητα στον διαχωρισμό βιομηχανικών αερίων, καθετήρες που να μην επιτρέπουν την ανάπτυξη βακτηρίων όταν χρησιμοποιούνται σε ασθενείς κ.ά.

«Οι ιδιότητες αυτές των υλικών υπαγορεύονται από τη χημική τους σύσταση και τη δομή τους σε μοριακό και υπερμοριακό επίπεδο. Είναι, λοιπόν, πολύ επιθυμητό να μπορούμε να προβλέπουμε ποσοτικά τις ιδιότητες των υλικών από τη φύση και τις αλληλεπιδράσεις των μικροσκοπικών δομικών λίθων (ατόμων, μορίων, ιόντων, ηλεκτρονίων) από τους οποίους αποτελούνται» προσθέτει ο Δώρας Θεοδώρου.

Στο εργαστήριό του και την Ομάδα Υπολογιστικής Επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών (CoMSE) στο ΕΜΠ, ο Δώρας Θεοδώρου αναπτύσσει νέες υπολογιστικές μεθόδους, ικανές να παρακολουθήσουν τα τεράστια φάσματα χαρακτηριστικών που διέπουν τη συμπεριφορά των υλικών, να ερμηνεύσουν τους μοριακούς μηχανισμούς που διαμορφώνουν τις ιδιότητές τους και να χρησιμεύσουν ως βάση για ορθολογικό σχεδιασμό νέων υλικών σε συνεργασία με τη διεθνή βιομηχανία. Όπως εξηγεί ο ίδιος, οι μέθοδοι και οι αλγόριθμοι που αναπτύσσει η ομάδα λειτουργούν σε πολλά επίπεδα (μοριακό – μεσοσκοπικό – μακροσκοπικό).

Μεγάλο μέρος των προσπαθειών της ομάδας αφορά τα πολυμερή. Τα υλικά αυτά μορφοποιούνται υπό κατάσταση τήγματος για να δώσουν την πληθώρα πλαστικών προϊόντων που χρησιμοποιούμε καθημερινά. Με υποστήριξη από το Ελβετικό Ίδρυμα Limmat, η ομάδα αναπτύσσει μεθόδους προτυποποίησης και προσομοίωσης σε διάφορες κλίμακες ικανές να προβλέψουν τις ιδιότητες ροής πολυμερικών τηγμάτων από τη χημική σύσταση και την κατανομή μπκνών των διαπλεγμένων αλυσίδων που τα απαρτίζουν. Επεκτείνοντας τις μεθόδους αυτές σε διεπιφάνειες, η ομάδα έχει θέσει βάσεις για τον μοριακό σχεδιασμό συγκολλητικών



## Γλωσσάρι

**ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ**  
Ο κλάδος της φυσικής που συνδέει τις μακροσκοπικές ιδιότητες ενός υλικού συστήματος με τις μικροσκοπικές καταστάσεις που αυτό μπορεί να προσλάβει. Μια μικροσκοπική κατάσταση καθορίζεται από το πού βρίσκονται και πώς κινούνται όλα τα σωματίδια που αποτελούν το σύστημα.

**ΠΟΛΥΜΕΡΗ**  
Υλικά αποτελούμενα από πολύ μεγάλα μόρια (μακρομόρια). Ένα μακρομόριο αποτελείται από πολλές επαναλαμβανόμενες ομάδες και μπορεί να έχει διάφορες αρχιτεκτονικές (γραμμική, δικλαδωμένη, τρισδιάστατου πλέγματος, αστεροειδή, κλειστού βρόχου κ.λπ.). Πολυμερή αποτελούμενα από περισσότερα του ενός είδη επαναλαμβανόμενων ομάδων λέγονται συμπολυμερή. Τόσο τα συνθετικά (π.χ. πολυαιθυλένιο, πολυστυρένιο) όσο και τα βιολογικά πολυμερή (π.χ. DNA, πρωτεΐνες) είναι κεφαλαίωδους σημασίας για την τεχνολογία και τη ζωή.

## Από τη μοριακή σύσταση στις ιδιότητες των υλικών

υλικών και επιστρωμάτων με ελεγχόμενη «διαβρεξιμότητα» από υγρά.

Στο πλαίσιο ευρωπαϊκών συνεργασιών που συντονίστηκαν από την BASF και το Ολλανδικό Ίνστιτούτο Πολυμερών (DPI), λέει ο Δώρας Θεοδώρου, η ομάδα ανέπτυξε μεθόδους για την πρόβλεψη της επίπτωσης των νανοσωματιδίων πάνω στις ιδιότητες και συνεχίζει μελετώντας πώς η διασπορά των νανοσωματιδίων μπορεί να βελτιωθεί με κατάλληλη τροποποίηση της επιφάνειάς τους.

Άλλες ερευνητικές προσπάθειες της ομάδας, σε συνεργασία με την εταιρεία Solvay, αποσκοπούν στην πρόβλεψη της συμπεριφοράς επιφανειακών ενεργών ουσιών με νέες μοριακές αρχιτεκτονικές μέσα σε υδατικά διαλύματα, για χρήση σε απορρυπαντικά και μέσα διασποράς. Επίσης στον μοριακό σχεδιασμό συμπολυμερικών επιστρωμάτων που να απωθούν τα βακτήρια από στερεές επιφάνειες. Πρό-

σφατα οι προσπάθειες της ομάδας έχουν επεκταθεί και σε βιολογικά συστήματα: εξετάζουμε πού, μέσα σε μια κυτταρική μεμβράνη, εντοπίζονται συγκεκριμένα φάρμακα και πώς τη διαπερνούν. Και όλα αυτά γίνονται από την Ελλάδα.

Το ερευνητικό έργο της ομάδας απαιτεί βαθιά κατανόηση θεμελιωδών επιστημονικών αρχών, δεξιότητα σε μαθηματικές και υπολογιστικές μεθόδους, αλλά και καλή γνώση των υλικών και συνθετική ικανότητα στην επίλυση των προβλημάτων σχεδιασμού τους. Βρίσκεται στο μεταίχμιο μεταξύ «science» και «engineering», πράγμα που το κάνει ιδιαίτερα απαιτητικό και ενδιαφέρον. Χάρη στην αφοσίωση των μελών της, η ομάδα καταφέρνει να είναι ανταγωνιστική διεθνώς. Η συμβολή της έχει αναγνωρισθεί αρκετά και από τη βιομηχανία, όπως φαίνεται από την πρόσφατη βράβευση του διευθυντή της με το DSM Lifetime Achievement Award το 2018.

## Τι λέει η «νέα γενιά»

### ΣΤΕΦΑΝΟΣ ΑΝΩΓΙΑΝΝΑΚΗΣ

«Στην επιστημονική μας ομάδα έχουμε τη δυνατότητα μέσα από τη συμμετοχή μας σε διεθνή ερευνητικά προγράμματα να αναπτύξουμε καινοτόμες υπολογιστικές μεθοδολογίες και αλγορίθμους, καθώς και να προσομοιώσουμε μια πληθώρα νέων υλικών. Οι μέθοδοι αυτές βοηθούν τόσο στην κατανόηση των φυσικοχημικών φαινομένων που διέπουν τις διεργασίες σύνθεσης και παρασκευής διαφόρων υλικών (πολυμερικών, νανοςύνθετων κ.λπ.) όσο και στον σχεδιασμό νέων με βελτιωμένες ιδιότητες».

### ΑΡΙΣΤΟΤΕΛΗΣ ΣΓΟΥΡΟΣ

«Το εργαστήριό μας συμβάλλει στην ανάπτυξη μιας πληθώρας υπολογιστικών μεθόδων που αφορούν τη μοντελοποίηση πολυμερών και βιομηχανικών διεργασιών σε ένα πολύ μεγάλο εύρος κλιμάκων χώρου και χρόνου. Η έρευνα που πραγματοποιούμε δίνει λύσεις σε πολυδιάστατα προβλήματα και παρουσιάζει πολύ σημαντικές εφαρμογές στη βιομηχανία των πολυμερών, τη βιολογία και τη νανοτεχνολογία».



Ο Στέφανος Ανωγιαννάκης είναι μεταδιδακτορικός ερευνητής



Ο Αριστοτέλης Σγούρος είναι μεταδιδακτορικός ερευνητής