*3η Ετήσια Έκθεση*

ΘΑΛΗΣ - *Nanocapillary*

MIS 375233

**ΠΕΡΙΟΔΟΣ ΑΝΑΦΟΡΑΣ:** 1/1/2014-31/12/2014

***Πρόλογος:***

Η παρούσα έκθεση αποτελεί παραδοτέο που εκπονήθηκε στα πλαίσια του έργου Θαλής με τίτλο «NANOCAPILLARY», το οποίο συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και εθνικούς πόρους στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Διά Βίου Μάθηση»

Στα πλαίσια του προγράμματος «Θαλής – ΤΕΙ Καβάλας-Nanocapillary» κρίθηκε μείζονος σημασίας η συλλογή και καταγραφή της επιστημονικής δραστηριότητας και των επιτευγμάτων που αφορούν τα υπό μελέτη νανοπορώδη υλικά ως προς την παρασκευή τους, την τροποποίησή τους καθώς και την εφαρμογή τους σε πειράματα μελέτης ροής ρευστού δια μέσω της δομής τους, μέχρι σήμερα.

***Στόχος***

Για να επιτευχθεί ο στόχος δημιουργήθηκε η αναγκαιότητα λήψης αποφάσεων λαμβάνοντας υπόψη τα κάτωθι δεδομένα:

- Αν έχει πραγματοποιηθεί άλλη έρευνα με το ίδιο πρόβλημα
- Αν ναι τι αποτελέσματα ανέκυψαν
- Ποιες μέθοδοι χρησιμοποιήθηκαν
- Η σημαντικότητα , καινοτομία, πρωτοτυπία του ερευνητικού προβλήματος
- Εντοπισμός και έλεγχος τάσεων και μεταβολών στη διάρκεια του χρόνου

Το NANOCAPILLARY σχεδιάζεται έτσι ώστε να είναι απολύτως φιλικό στον χρήστη, να του παρέχει τις βασικές αρχές σκέδασης και προσρόφησης, να καλύπτει όλο το φάσμα των πορωδών υλικών (ultra, micro, meso και macro) και συγχρόνως να επιτρέπει την επεξεργασία των αποτελεσμάτων με προχωρημένες μεθόδους.

Το υποέργο πέραν των άλλων διακρίνεται και για την ρεαλιστικότητα του παραδοτέου του που είναι το υπό ανάπτυξη λογισμικό. Αξίζει να σημειωθεί ότι στην παγκόσμια αγορά δεν

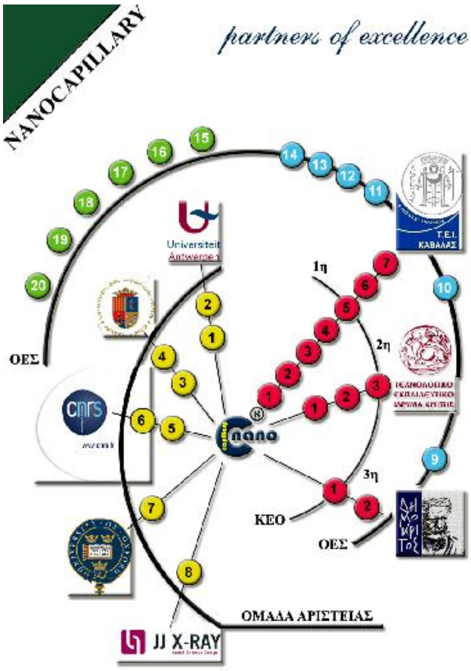

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

υφίσταται ανάλογο ελεύθερο λογισμικό και τα τυχόν υπάρχοντα δεν επικοινωνούν μεταξύ τους αφού συνοδεύονται από προσφερόμενο hardware.

Με την συμμετοχή των δύο ερευνητικών ομάδων (ΚΕΟ και ΟΕΣ πραγματοποιήθηκαν:

- Καταγραφή των εργασιών
- Επιστημονική επεξεργασία και σύνταξη εκθέσεων
- Συνεχής αξιολόγηση (on going evaluation) της πορείας του έργου
- Διαμόρφωση και πιλοτική εφαρμογή ιστοσελίδας
- Τήρηση του χρονοδιαγράμματος

***<u>Ομάδες Έργου:</u>***




Το πρόγραμμα εκπονείται από την (ΚΕΟ) κύρια ερευνητική ομάδα και την (ΟΕΣ) Ομάδα Εξωτερικών Συνεργατών , που όσον αφορά την παρούσα έκθεση έχει την εξής σύνθεση:

**ΚΕΟ**


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. Ομάδα ΤΕΙ Καβάλας
2. Ομάδα ΤΕΙ Κρήτης
3. Ερευνητικό Κέντρο Δημόκριτος

**ΟΕΣ**

Ιδιαίτερη αναφορά στη συνεργασία με 5 διακεκριμένα Πανεπιστήμια και Ερευνητικά Κέντρα του εξωτερικού:

1. University of Antwerp
2. University of Oxford
3. University of Alicante
4. CNRS
5. JJ X-Ray Systems ApS

***<u>Μεθοδολογία:</u>***


Η μεθοδολογία που περιγράφεται παρακάτω αποτελεί μια συστηματική προσπάθεια προσέγγισης. Παρουσιάστηκε σε μία πρωτόλεια αλλά ταυτόχρονα σε μία άκρως οργανωμένη μορφή, «Log Book», και στην οριστική της μορφή διαμορφώθηκε με την παρούσα έκθεση. Το βιβλίο καταγραφής (log book) αποσκοπεί στην ακριβή καταγραφή όλων των σκέψεων και υπολογισμών ή βημάτων που ακολουθήθηκαν μπορούν να χρησιμοποιηθούν ακόμα και σήμερα με απώτερο στόχο την εξαγωγή συμπερασμάτων αλλά και αναπαραγωγή των διάφορων υπολογισμών ή πειραμάτων.

Το Log Book δημιουργήθηκε χρησιμοποιώντας:

- Περιγραφικές επικεφαλίδες,
- Λίστα των οργάνων μέτρησης που χρησιμοποιούνται
- Σχεδιαγράμματα της πειραματικής διάταξης
- Παρατηρούμενα δεδομένα.


Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η παρούσα έκθεση περιλαμβάνει στο κυρίως τμήμα της, την εισαγωγή, τον στόχο, την μεθοδολογία, τις ομάδες έργου και το Nanocapillary.

Κατά τους αναφερόμενους μήνες πραγματοποιήθηκαν τα εξής, ανά πακέτο εργασίας, του εγκεκριμένου ΤΔ του έργου:

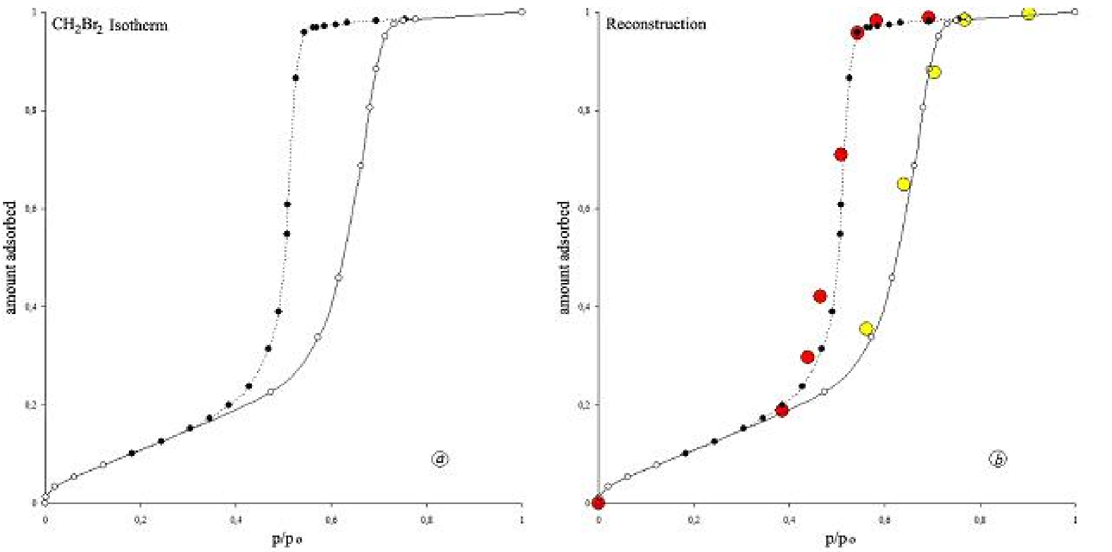
**Π.Ε.3.** Τα *In Situ* πειράματα βρίσκονται σε εξέλιξη. Αυτά αποτελούν ένα μεγάλο τμήμα του ερευνητικού έργου "Nanocapillary" και η συνεχής τριβή της ερευνητικής ομάδας θα διαρκέσει έως και την λήξη του έργου. Συγκεκριμένα το Π.Ε.3 περιγράφει την πραγματοποίηση τριών ξεχωριστών πειραμάτων in situ σκέδασης ακτίνων–Χ και όχι μόνο.

**1. <u>ΠΕΙΡΑΜΑ 1</u>**

Η διαδικασία "σάρωσης" του βρόγχου υστέρησης της ισόθερμης ρόφησης $CH_2B_{r2}$ σε δείγμα υάλου Vycor® 7930 αποτελεί ένα ιδιαίτερα απαιτητικό πείραμα, όπου η διαδικασία δοσολογίας της ροφούμενης ουσίας, $CH_2Br_2$, απαιτείται να είναι ιδιαίτερα ακριβής. Για τον σκοπό αυτό το δείγμα, δισκίο πορώδους υάλου Vycor® 7930 διαμέτρου 10 mm και πάχους , τοποθετήθηκε για την πραγματοποίηση της ισόθερμης σε αυτόματη συσκευή προσρόφησης με δυνατότητα σάρωσης του βρόγχου υστέρησης (*Intelligent Gravimetric Analyser*, IGA).



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




**Εικόνα 1.** (α) Ισόθερμη ρόφησης $CH_2Br_2$ σε δισκίο Vycor® 7930 και (β) ανακατασκευή της ισόθερμης με δεδομένα σκέδασης ακτίνων–X σε μικρές γωνίες.

Η ισόθερμη ρόφησης $CH_2Br_2$ πραγματοποιήθηκε στους 20 $^{o}$C ενώ τα πειράματα σκέδασης ακτίνων–X έλαβαν χώρα σε όργανο σκέδασης ακτίνων–X με πηγή CuKa και 2D ανιχνευτή της εταιρείας Rigaku. Η περιοχή του ανύσματος σκέδασης $Q$ καθορίστηκς σε 0.005 – 0.15 $Å^{-1}$ (όπου $Q$=4πsin$\theta/\lambda$ το άνυσμα σκέδασης, με $\lambda$ και 2$\theta$ το μήκος κύματος και την γωνία σκέδασης αντίστοιχα).

Όπως φαίνεται στην εικόνα 1 η ισόθερμη είναι τύπου IV με βρόγχο υστέρησης H2 χαρακτηριστικό για μεσοπορώδη υλικά με μη οργανομένη διάταξη πόρων. Επίσης η ανακατασκευή της ισόθερμης από τα δεδομένα σκέδασης είναι σε άριστη συμφωνία με την αντίστοιχη η οποία προέρχεται από την βαρομετρική μέθοδο.

Ο κλάδος της εκρόφησης καταγράφεται οξύς στην περιοχή του βρόγχου γεγονός που υποδηλώνει ένα “βίαιο” μηχανισμό εκκένωσης της προσροφούμενης ουσίας ($CH_2Br_2$) από τους πόρους.

Ένα σημαντικό φαινόμενο το οποίο αποκαλύπτεται είναι αυτό της ανομοιογένειας των βρόγχων (εντός του κυρίου βρόγχου υστέρησης) κάτι το οποίο μπορεί να αποδοθεί και στην ύπαρξη ενός t-film στα τοιχώματα των πόρων. Η διάσταση αυτού του t-film “διορθώνεται” με χρήση της εξίσωσης:



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$\Delta(p) = (V_D - V_A)\left[\frac{\left(R - t(p)\right)^2}{(R - t(pA))^2} - 1\right]$$

Το πάχος του t-film υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την εξίσωση του Hasley $\ln(p/po)=K/t^m$, με παραμέτρους της καμπύλης: K = 61.8 και m = 2.219.

## 2. <u>ΠΕΙΡΑΜΑ 2</u>

Το πείραμα 2 αφορά την in situ μελέτη ρόφησης $CH_2Br_2$ σε Vycor® 7930 και σκέδασης ακτίνων–Χ υπό περιστροφή. Το κελί έχει ήδη ετοιμαστεί και έχουν πραγματοποιηθεί πειράματα σε ξηρή αλλά και κορεσμένη ύαλο υπό περιστροφή. Τα πρώτα αποτελέσματα είναι υπό εξέταση. Πρέπει να σημειωθεί ότι η πρωτοτυπία του εγχειρήματος αποτελεί ταυτόχρονα και ένα παράγοντα συνεχής μελέτης των αποτελεσμάτων δεδομένου ότι κάθε πειραματικό αποτέλεσμα είναι τόσο καινούργιο που χρήζει ιδιάιτερης προσοχής κατά την ανάλυση.

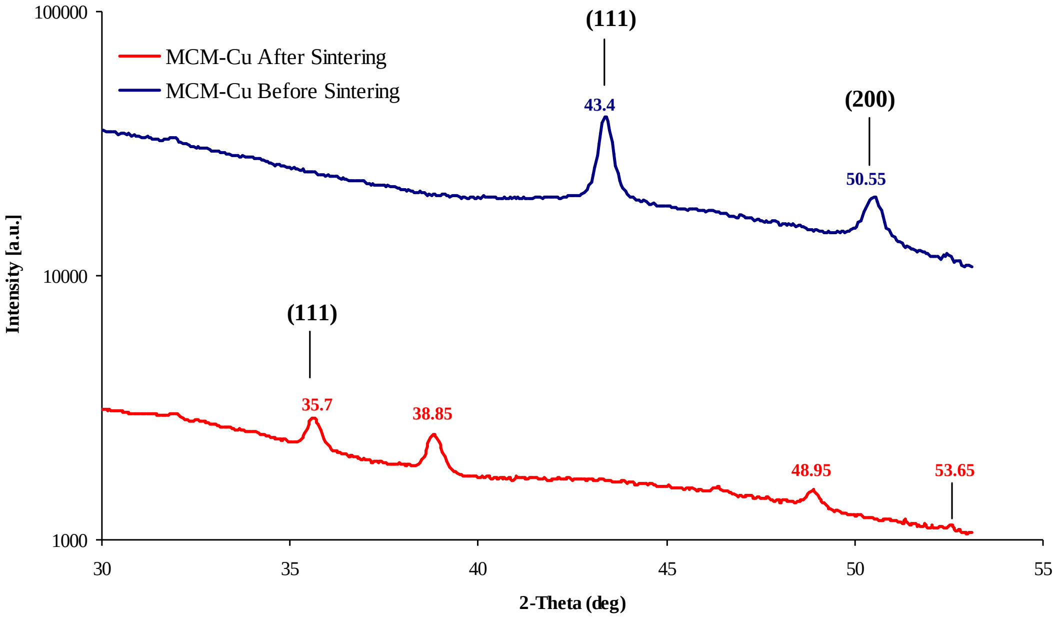
Περισσότερες πληροφορίες αναμένονται στις αντίστοιχες εκθέσεις πεπραγμένων και άλλων μελών της ερευνητικής ομάδας που εμπλέκονται στο συγκεκριμένο πείραμα.

## 3. <u>ΠΕΙΡΑΜΑ 3</u>

Το πείραμα 3 αφορά την *in situ* και *ex situ* μελέτη και άλλων υλικών πέρα της πορώδους υάλου. Κατά την διάρκεια του έργου τόσο SBA-15 όσο και μικροπορώδεις άνθρακες αλλά και μεσοπορώδεις MCM-41 και μεσοπορώδεις MCF-LA μελετούνται τόσο με *in situ* πειράματα ρόφησης και SAXS όσο και με τον συνδυασμό και άλλων τεχνικών.
Ακολούθως παρουσιάζονται αποτελέσματα πειραμάτων παρασκευασμένων σύνθετων υλικών MCM-41 και νανοσωματιδίων χαλκού. Συγκεκριμένα τόσο η διαδικασία παρασκευής όσο και τα πρώτα φάσματα περίθλασης ακτίνων–Χ ακολουθούν και συζητούνται. Αξίζει να σημειωθεί ότι η βελτίωση των ιδιοτήτων τέτοιων μεσοπορωδών υλικών υλικών αποτελεί επιτακτικό στόχο της επιστημονικής και τεχνολογικής κοινότητας αφού ιδιότητες όπως αυτές της υψηλής και εκλεκτικής ρόφησης αερίων αλλά και καταλυτικές ιδιότητες είναι στόχοι οι οποίοι έχουν τεθεί με υψηλή την προσδοκία της εκπλήρωσής τους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




**Εικόνα 2.** Φάσματα περίθλασης ακτίνων–X (XRD) στα παρασκευασμένα δείγματα MCM-41 με νανοσωματίδια χαλκού.

Στην εικόνα 2 παρουσιάζονται τα φάσματα περίθλασης ακτίνων–X για τα 2 δείγματα νανοσύνθετης σίλικας MCM-41/Cu πριν (μπλέ γραμμή) και μετά (κόκκινη γραμμή) την διεργασία της πυροσυσσωμάτωσης (sintering). Και στα δύο φάσματα καταγράφονται δύο χαρακτηριστικές κορυφές, σχετικά “ευρείες”. Για το υλικό πριν την διεργασία της πυροσυσσωμάτωσης οι κορυφές αποτυπώνονται σε $2\theta = 43.4^o$ και $2\theta = 50.55^o$ και αναφέρονται στις χαρακτηριστικές κορυφές (111) και (200) του μεταλλικού χαλκού. Κάνοντας χρήση της σχέσης Scherre υπολογίστηκε το μέσο μέγεθος των σωμματιδίων χαλκού ίσο με ~ 17 nm.

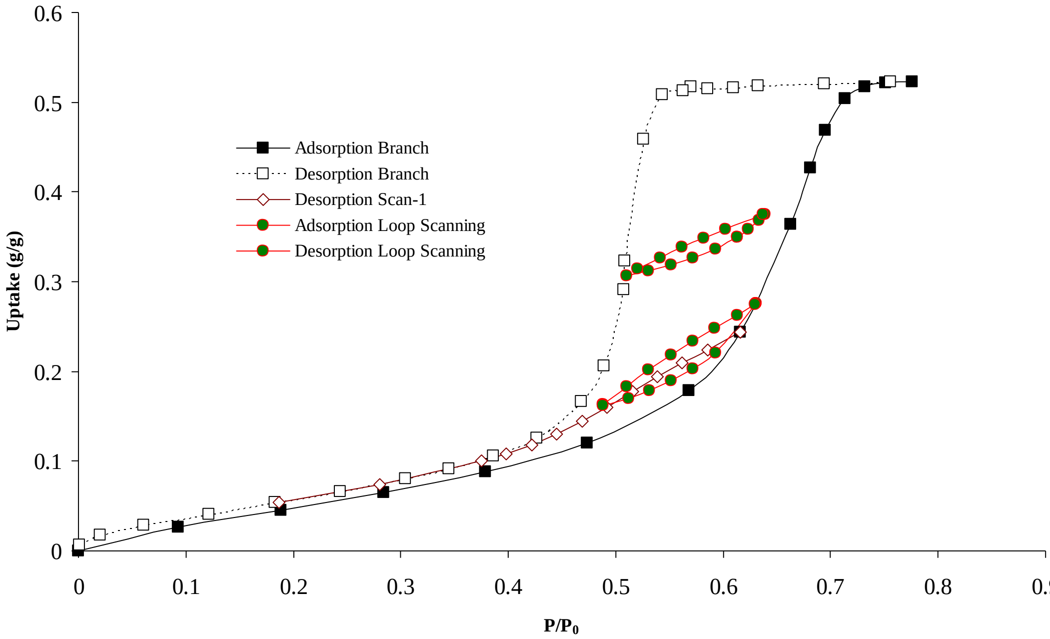
Μετά την διεργασία της πυροσυσσωμάτωσης λαμβάνει χώρα μια συρρίκνωση της δομής του υλικού. Πέραν τούτου και όπως τα φάσματα περίθλασης ακτίνων–X καταδεικύουν τα νανοσωματίδια του χαλκού μετατρέπονται στα οξείδιά του CuO, $Cu_2O$ ή $Cu(OH)_2$ δίνοντας χρακτηριστικές κορυφές σε $2\theta = 35.7^o$ and $2\theta = 38{,}85^o$ εκ των οποίων η κορυφή στις $35.7\,^o$ αναφέρεται στην κορυφή (111)…. The particles synthesized were determined as copper oxide particles such as CuO, $Cu_2O$ or $Cu(OH)_2$. Κάνοντας χρήση της σχέσης Scherre για την κύρια κορυφή υπολογίστηκε το μέσο μέγεθος των σωμματιδίων χαλκού ίσο με ~ 19 nm.

**Φυσικοχημικός χαρακτηρισμός των υλικών**



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στη προηγούμενη έκθεση πεπραγμένων παρουσιάστηκε η ισόθερμη ρόφησης $CH_2Br_2$ σε θερμοκρασία 20 $^oC$ και οι τρεις καμπύλες σάρωσης κατά την εκρόφηση (desorption scanning curves). για την πορώδη ύαλο Vycor 7930. Το πείραμα διεξήχθη με χρήση αυτόματης σταθμικής συσκευής υψηλής πίεσης (IGA-001 της εταιρείας HIDEN - βλ. προηγούμενη έκθεση για περιγραφή της συσκευής). Στη συνέχεια μετρήθηκαν δύο υποβρόχοι (subloops), ένας κατά τη ρόφηση και ένας κατά την εκρόφηση, εντός του βρόχου υστέρησης (Σχ. 1). Αξίζει να σημειωθεί ότι υπήρξε μεγάλη δυσκολία για τη μέτρηση αυτών των υποβρόχων (εύρεση της κατάλληλης πίεσης μέσα στο βρόχο υστέρησης, μεγάλοι χρόνοι ισορροπίας κα). Η διάρκεια του πειράματος ήταν περίπου 2 μήνες. Οι καμπύλες σάρωσης και οι υποβρόχοι θα μελετηθούν εκτενώς κατόπιν σύγκρισης με τις αντίστοιχες καμπύλες σάρωσης και τους υποβρόχους που θα ανακατασκευαστούν από την ανάλυση των πειραματικών καμπύλων που εκλήφθηκαν από τα in situ πειράματα μικρογωνιακής σκέδασης ακτίνων-x (SAXS).



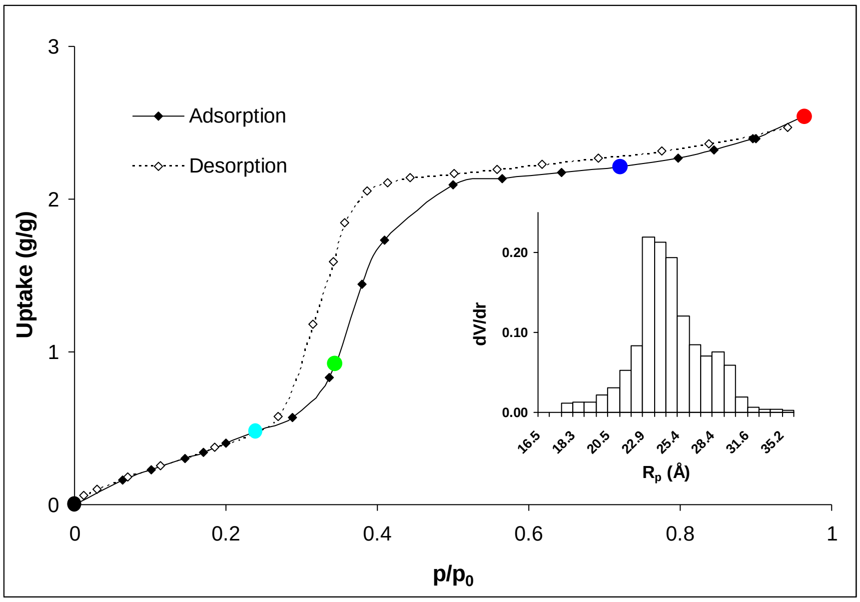

**Σχήμα 1.** Ισόθερμος ρόφησης και υποβρόχοι $CH_2Br_2$ σε Vycor 7930 στους 20 $^oC$.

### Π.Ε.4. Ανάλυση αποτελεσμάτων



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Οι καμπύλες σκέδασης SAXS μετρήθηκαν σε συγκεκριμένα σημεία της ισοθέρμου ρόφησης του διβρωμομεθανίου σε MCM-41 στους 293 K (βλ. Σχ. 2) και παρουσιάζονται στο Σχ. 3.

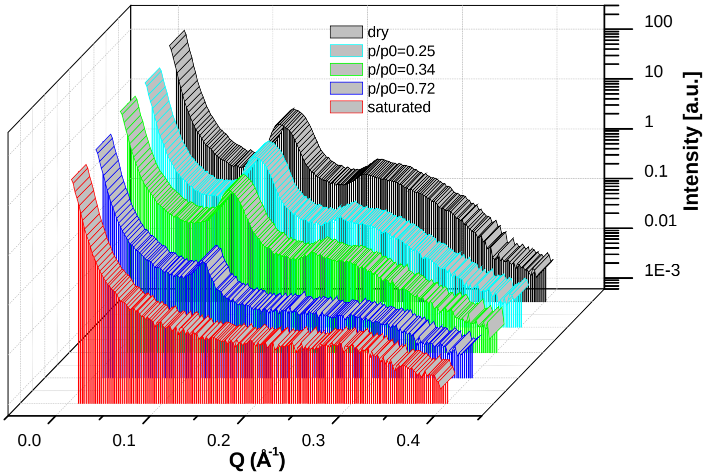



**Σχήμα 2.** Ισόθερμος $CH_2Br_2$ σε MCM-41 στους 293 K. Οι κύκλοι δείχνουν τα σημεία της ισοθέρμου όπου πραγματοποιήθηκαν οι μετρήσεις SAXS. Ιστόγραμμα: Η κατανομή των πόρων όπως υπολογίστηκε από την ισόθερμη $N_2$ σύμφωνα με τη μέθοδο Non-Local Density Functional Theory (NLDFT)

Η εμφάνιση των κορυφών Bragg οφείλεται στη περιοδική διάταξη των κυλινδρικών πόρων. Παρατηρείται ότι στη περιοχή των μικρών γωνιών ($0.01<Q$ (Å$^{-1}$) $<0.09$) η σκεδαζόμενη ένταση ακτινοβολίας μεταβάλλεται αναλόγως του $I(Q)\sim Q^{-a}$. Σύμφωνα με τη θεωρία όταν $a$=4, η ένταση ακτινοβολίας φθίνει ασυμπτωτικώς κατά $Q^{-4}$ ακολουθώντας το νόμο του Porod. Αυτή η συμπεριφορά υποδεικνύει ότι η σκέδαση οφείλεται σε αντικείμενα μεγαλύτερα από τους κυλινδρικούς μεσοπόρους. Συγκεκριμένα αυτό παρατηρείται στην ουρά της καμπύλης σκέδασης όταν $Qd>4$, όπου $d$ είναι το μέγεθος του σκεδαστή. Στη περίπτωσή μας $d>400$ Å. Επομένως η σκέδαση οφείλεται στους κόκκους του υλικού (intergrain scattering). Επιπρόσθετα η επιφανειακή τραχύτητα μπορεί να προκαλέσει αποκλίσεις από το νόμο του Porod. Συγκεκριμένα, $a=6-D_s$ για μία τραχεία επιφάνεια με μορφοκλαματική διάσταση επιφάνειας (surface fractal dimension) $2< D_s <3$. Προφανώς για λεία επιφάνεια $a$=4 και $D_s$=2. Οι κλίσεις των καμπύλων σκέδασης για το ξηρό και υγρό MCM-41 κυμαίνονται μεταξύ $2.3<D_s<2.6$. Ωστόσω, στη περίπτωση του κορεσμένου MCM-41


Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

($p/p_0$=1), η επιφάνεια γίνεται λεία, πιθανώς λόγω της παρουσίας του διβρωμομεθανίου στην εξωτερική επιφάνεια.




**Σχήμα 3.** *In situ* καμπύλες σκέδασης SAXS του MCM-41 κατά τη διάρκεια ρόφησης $CH_2Br_2$.

Οι δύο πρώτες κορυφές περίθλασης Bragg (10) και (11) του MCM-41 διακρίνονται καθαρά στο ξηρό δείγμα και στα πρώτα στάδια της πλήρωσης των πόρων. Στο σημείο ισορροπίας $p/p_0$=0.25 εμφανίζεται η τρίτη κορυφή (20) στα 0.25 Å$^{-1}$ η οποία γίνεται ευδιάκριτη στην ισορροπία $p/p_0$=0.34. Αυτό συμβαίνει γιατί στη συγκεκριμένη σχετική ισορροπία έχουν γεμίσει όλοι οι μη διατεταγμένοι μικροπόροι με αποτέλεσμα να γίνεται διακριτή η περιοδικότητα των διατεταγμένων κυλινδρικών πόρων. Η σκεδαζόμενη ένταση της κύριας κορυφής (10) μειώνεται με τη μείωση της σχετικής πίεσης. Όταν λάβει χώρα η τριχοειδής συμπύκνωση ($p/p_0$=0.72), όπου το σύνολο των πόρων έχει σχεδόν γεμίσει με διβρωμομεθάνιο, οι κορυφές (11) και (20) εξαφανίζονται και μόνο η κύρια κορυφή είναι ορατή. Τέλος στη περίπτωση του κορεσμένου δείγματος ($p/p_0$=1) υπάρχει περαιτέρω μείωση της σκεδαζόμενης έντασης ενώ εξαφανίζονται όλες οι κορυφές Bragg. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι το $CH_2Br_2$ έχει την ίδια ηλεκτρονιακή πυκνότητα με την αργιλία (MCM-41) και δημιουργεί εξομοίωση των αντιθέσεων (contrast matching) με αποτέλεσμα τη σημαντική ελάττωση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

**Αναφορά Υάλων**

Η παρούσα αναφορά των υάλων αφορά την παρουσίαση της προόδου του έργου όσον αφορά την χρήση υάλων και συγκεκριμένα του vycor 7930.Το Vycor 7930 είναι η εμπορική ονομασία ενός υάλου υψηλής θερμοκρασίας της εταιρείας Corning. Η βασική του ιδιότητα είναι ότι έχει πολύ υψηλή θερμική αντίσταση. Πρόκειται για ένα τυπικό μεσοπορώδες υλικό που είναι κατάλληλο για τη μελέτη των ιδιοτήτων των ρευστών και των μορίων στο νανοχώρο[i]. Η διαδικασία παρασκευής της ύαλου αυτής ανακαλύφθηκε το 1938 από τους Hood και Nordberg[ii] και έκτοτε έχει προσελκύσει το ενδιαφέρον πολλών ερευνητών, τα δε δομικά χαρακτηριστικά της έχουν γίνει αντικείμενο πολλών μελετών. Κατά την παρασκευαστική διαδικασία ένα μείγμα από 75% $SiO_2$, 5% $Na_2O$ και 20% $B_2O_3$ υπό κατάλληλη θερμική επεξεργασία διαχωρίζεται σε δύο φάσεις. Μια από αυτές τις φάσεις είναι πλούσια σε πυριτία και η άλλη σε οξείδια των νατρίου και βορίου. Η δεύτερη αυτή φάση είναι διαλυτή σε οξέα και έτσι μπορεί να απομακρυνθεί αφήνοντας πίσω της μια άκαμπτη κυψελοειδή δομή που διατηρεί την αρχική μορφή του δοκιμίου και που είναι πλήρως διαπερατή από το ύδωρ. Η περαιτέρω διάλυση ή πλύση καθαιρεί τη φάση της πυριτίας η οποία μπορεί να θερμανθεί αργά προς αφυδάτωση και να επανυαλοποιηθεί στους $900^oC$ προς παραγωγή ενός ομοιογενούς τεμαχίου που έχει την εξής σύσταση: 5% $B_2O_3$, 0,5% $Na_2O$ και το υπόλοιπο $SiO_2$. Στα αρχικά στάδια της ξήρανσης, που περιλαμβάνουν την απομάκρυνση του τριχοειδούς ύδατος, η ύαλος που είναι διαφανή όταν είναι διυγραμένη, καθίσταται θολή (υπόλευκη). Καθώς η εξάτμιση προχωρεί η οπτική διαφάνεια αυξάνεται και όταν η ύαλος καταστεί ξηρή απομένει μία γαλαζωπή οπαλιοειδής χροιά.

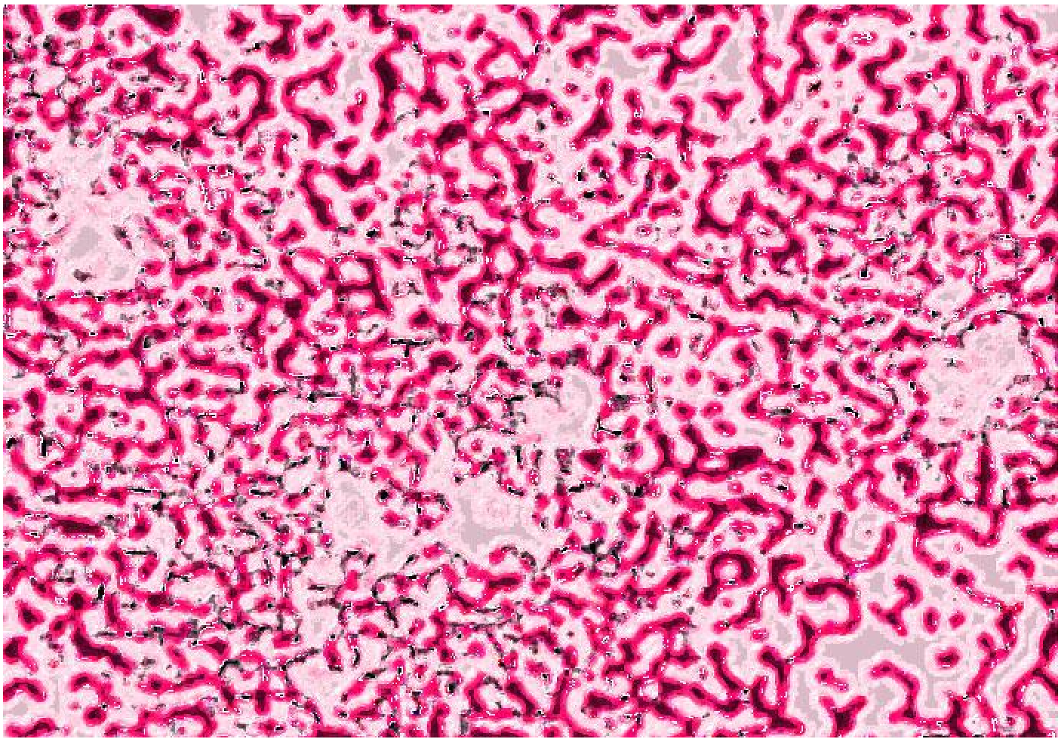
Η θόλωση οφείλεται στον προσωρινό σχηματισμό χιλιάδων μηνίσκων ύδατος στο εσωτερικό της ύαλου οι οποίοι λειτουργούν ως κέντρα διασποράς του φωτός. Η αρχή της θολότητας συμπίπτει με την αρχή του απότομου μέρους της ισοθέρμου εκρόφησης που για ανάλογες παρατηρήσεις σε συστήματα πυριτικών υδατοπηκτών ο Zsigmondy[iii] αποκάλεσε 'σημείο θόλωσης'.

Από μία συνστερεοποιημένη ράβδο πορώδους ύαλου Vycor θα κοπούν με πριόνι αδάμαντα 10 δισκία πάχους περίπου 0,5mm. Οι μακροσκοπικές διαστάσεις των δοκιμίων θα μετρηθούν με ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σαρώσεως (SEM). Τα δοκίμια θα καθαριστούν με 30% $H_2O_2$ και θα εκτεθούν στους $350^oC$ υπό συνεχή ροή οξυγόνου. Επειδή η ύαλος διαφέρει από παρτίδα σε παρτίδα το δείγμα που θα χρησιμοποιηθεί στο προτεινόμενο υποέργο θα



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

χαρακτηριστεί προπαρασκευαστικά με όλες τις μεθόδους ρουτίνας και συγκεκριμένα: α) προσρόφηση, β) διαπερατότητα και γ) SAXS.



**Σχ.1.** Ψηφιακή μικρογραφία ηλεκτρονικού μικροσκοπίου εκπομπής σε υπέρλεπτο τεμάχιο ύαλου Vycor[iv].

Κατά το συγκεκριμένο χρονικό διάστημα πραγματοποιήθηκαν μια σειρά πειραμάτων τόσο στο εργαστήριο Ήφαιστος του ΤΕΙ Ανατολικής Μακεδονίας και Θράκης όσο και στον ΕΚΕΦΕ Δημόκριτο. Τα πειράματα αφορούσαν τόσο των χαρακτηρισμό του υλικού με κλασσικές μεθόδους όπως η περίθλαση των ακτίνων – Χ (XRD) και ηλεκτρονική μικροσκοπία (SEM), αλλά και μικρογωνιακή σκέδαση ακτίνων – Χ (SAXS). Για τους παραπάνω λόγους έγιναν αρκετές μετακινήσεις από και προς την Αττική και προς άλλες ερευνητικές ομάδες που συμμετέχουν στο έργο Nanocapillary.

**Αναφορά MCM & SBA**

Τα μεσοπορώδη υλικά είναι τα υλικά που έχουν μέσο όρο διαμέτρο πόρων από 2 έως και 50nm κατά IUPAC. Στην επιστήμη της φυσικής ο πόρος είναι η μέτρηση της διαμέτρου ενός κενού (χωρίς παρουσία υλικού). Ειδικότερα, ένα πορώδες υλικό παρουσιάζει περίσσεια

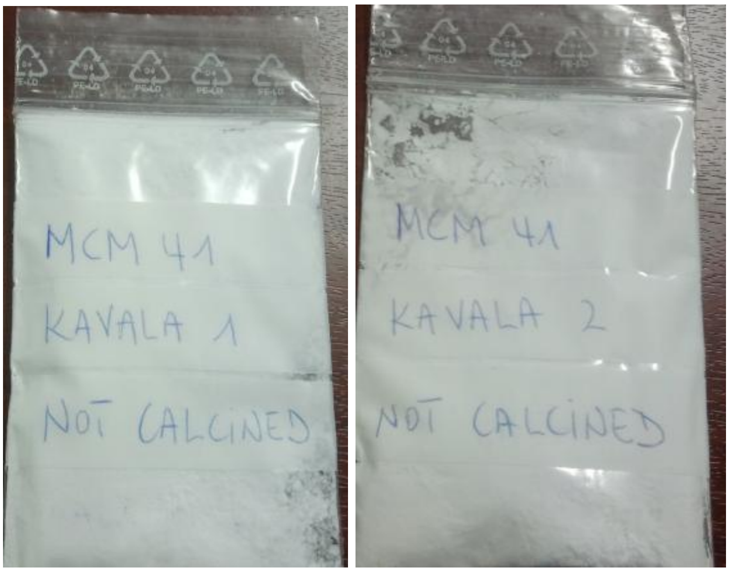


Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

οπών. Δύο από τις κύριες εφαρμογές των πορωδών υλικών είναι η μεταφορά εντός των πόρων τους άλλων υλικών και η δεύτερη σημαντικότερη εφαρμογή τους είναι η χρήση τους ως φίλτρα έτσι ώστε να απορρυπαίνουν.

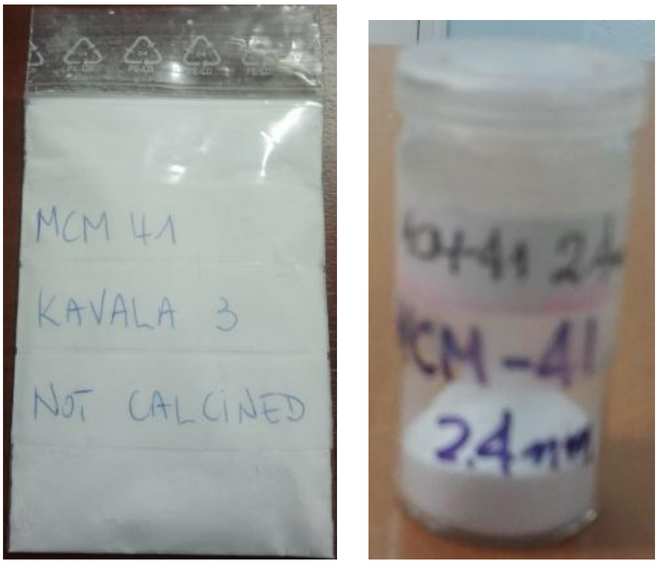
Κατά το συγκεκριμένο χρονικό διάστημα αναπτύχθηκαν μια σειρά υλικών MCM και SBA καθώς και άλλα μεσοπορώδη με κύρια βέβαια τα SBA – 15 και MCM – 41. Τα υλικά αυτά παρασκευάστηκαν στα εργαστήρια του πανεπιστημίου του Antwerp, του πανεπιστημίου του Alicante και του ΕΚΕΦΕ Δημόκριτος. Ακόμα αξίζει να σημειωθεί ότι χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές μέθοδοι σύνθεσης, με σκοπό να ελεγχθούν διαφορετικές παράμετροι αυτών των υλικών.

Στην αναφορά παρουσιάζονται οι βασικές μέθοδοι σύνθεσης των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν. Επίσης γίνεται μια σύντομη περιγραφή του κάθε υλικού και τέλος παρουσιάζονται εικόνες των δειγμάτων που προήλθαν από την σύνθεσης του και βρίσκονται στο εργαστήριο Ήφαιστος του ΤΕΙ ΑΜΘ.





Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




**Εικ. 5.** Δείγματα MCM – 41 που βρίσκονται στο εργαστήριο Ήφαιστος του ΤΕΙ ΑΜΘ

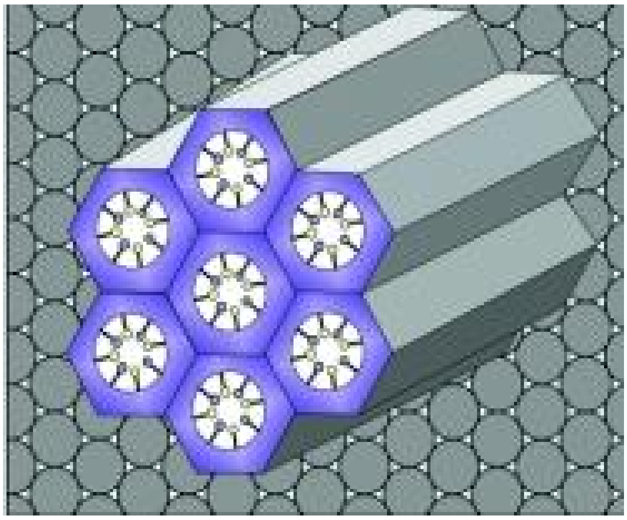
Στην εικόνα 5 παρουσιάζονται 3 διαφορετικά δείγματα MCM – 41 που παρασκευάστηκαν με διαφορετικούς τρόπους σύνθεσης και τους υπολείπεται το τελευταίο στάδιο επεξεργασίας που είναι το calcination. Επιπλέον εικονίζεται ένα ακόμα δείγμα που χρησιμοποιήθηκε για την διεξαγωγή πειραμάτων με διαφορετικές τεχνικές, όπως για παράδειγμα SAXS, XRD, SEM, TEM, Nitrogen Porosimetry κ.α

## 1. SBA

### 1.1 Γενική περιγραφή του SBA

Το SBA ανακαλύφθηκε 6 χρόνια αργότερα από το MCM και πήρα το όνομα του από το Πανεπιστήμιο της Καλιφόρνια Santa Barbara (Santa Barbara Amorphous). Τα SBA συναντώνται σε μια πολύ ευρεία κλίμακα στην βιβλιογραφία, με διαφορετικούς τρόπους παρασκευής και διαφορετική. Η δομή του SBA ποικίλει σε κυβική, τρισδιάστατο εξαγωνικό δίκτυο, δισδιάστατο εξαγωνικό κα. Το ποίο αντιπροσωπευτικό δείγμα του SBA είναι το SBA – 15 το οποίο συνδυάζει μίκρο και μέσο πόρους με οργανωμένους σωληνωτούς μεσοπόρους της τάξης των 4 – 14nm. Το μέγεθος των μικροπόρων που μπορούν να βρεθούν στο SBA – 15 εξαρτάται άμεσα από την μέθοδο σύνθεσης τους. Ενδεικτικά παρουσιάζονται μερικές μέθοδοι σύνθεσης του SBA – 15.


Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



**Εικ. 6** Γραφική αναπαράσταση του υλικού SBA - 15

Το σχήμα και η καμπυλότητα των πόρων καθορίζουν κατά κύριο λόγο την ικανότητα ρόφησης αερίων. Οι μίκροποροι στα τοιχώματα του SBA – 15 προέρχονται από την χρήση του (PEO) πολυεθυλενιοοξείδιο σε τριπολυμερή. Με την αλλαγή του πολυαιθυλενιοοξειδίου μπορούν να δημιουργηθούν διαφορετικά μεγέθη πόρων και ταυτόχρονες αλλαγές στο πάχος των τοιχωμάτων του υλικού. Μια άλλη μέθοδος αλλαγής των δομικών χαρακτηριστικών των πόρων μπορεί να πραγματοποιηθεί με αλλαγές στην θερμοκρασία σύνθεσης των δειγμάτων, του ph, των αλάτων, των ηλεκτρολυτών κ α.

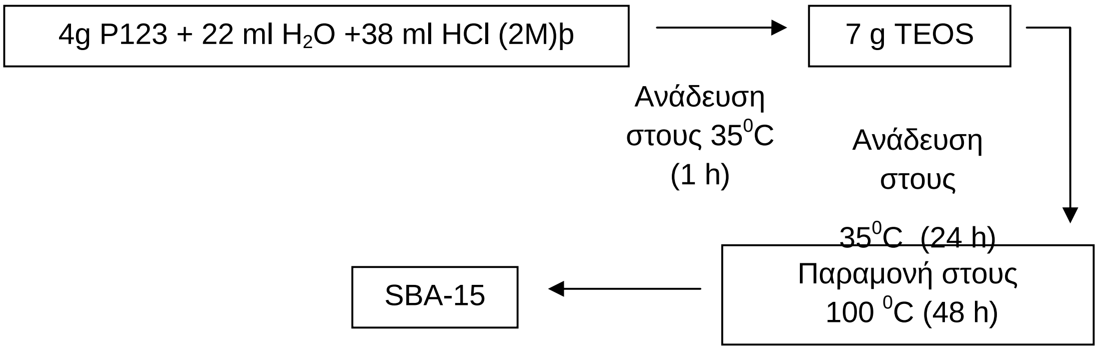
Το SBA – 15 μπορεί να συντεθεί απλά χρησιμοποιώντας το χαμηλού κόστος πυρίτιο. Με την χρήση διαφόρων μορφών πυριτίου επιτυγχάνονται ταυτόχρονα και γρηγορότερες διαδικασίες.

### 1.2 Μέθοδοι Σύνθεσης

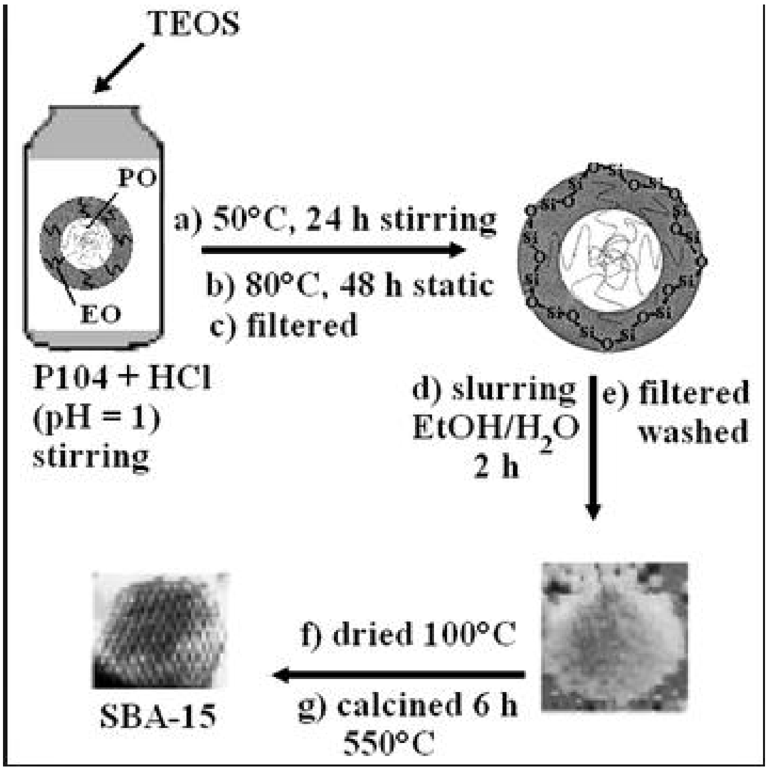
Μια από τις απλούστερες μεθόδους παρασκευής SBA – 15 είναι αυτή που ακολουθεί στο διάγραμμα. Τα υλικά που χρειάζονται είναι τα P123, νερό, HCl, TEOS, ανάδευση και θέρμανση των διαλυμμάτων.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

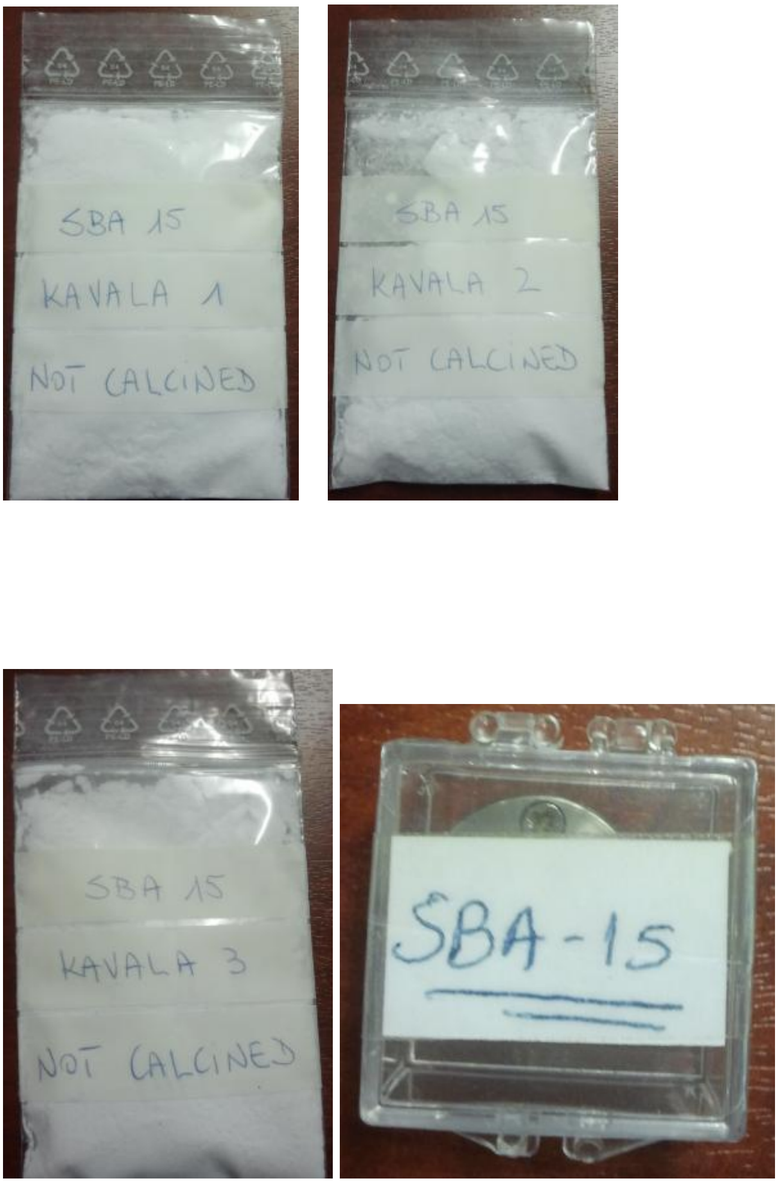



Μία εξίσου απλή διαδικασία είναι και αυτή που εικονίζεται στην Εικ. 7. Σε αυτή την περίπτωση απαιτούνται περίπου 3 ημέρες για την σύνθεση του δείγματος. Τα υλικά που απαιτούνται σε αυτή την περίπτωση είναι TEOS, P104, HCl, EtOH και νερό.




**Εικ. 7** Σύνθεση του υλικού SBA – 15


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ




**Εικ. 8.** Δείγματα SBA – 15 που βρίσκονται στο εργαστήριο Ήφαιστος του ΤΕΙ ΑΜΘ

Στις ως άνω φωτογραφίες, παρουσιάζονται 3 διαφορετικά δείγματα SBA -15 που παρασκευάστηκαν με διαφορετικούς τρόπους σύνθεσης και τους υπολείπεται το τελευταίο στάδιο επεξεργασίας που είναι το calcination. Επιπλέον εικονίζεται ένα ακόμα δείγμα που χρησιμοποιήθηκε για την διεξαγωγή πειραμάτων με διαφορετικές τεχνικές, όπως για παράδειγμα SAXS, XRD, SEM, TEM, Nitrogen Porosimetry κ.α



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

**Log book**

Επιστήμονες και μηχανικοί καταγράφουν εργαστηριακά δεδομένα σε βιβλιοδετημένους τόμους ή κατάλληλα τετράδια τα οποία έχουν προηγούμενη σελιδοποίηση. Οι τόμοι αυτοί χρησιμοποιούνται σαν αρχεία κάποιας συγκεκριμένης εργασίας και μπορούν ακόμα να χρησιμοποιηθούν σαν νόμιμα αποδεικτικά στοιχεία σε περιπτώσεις αντιδικίας περί προτεραιότητας κάποιας ανακάλυψης. Η χρήση ενός τέτοιου βιβλίου βοηθά στο να αναπτυχθούν καλές εργαστηριακές συνήθειες οι οποίες θα βοηθήσουν στην μετέπειτα πορεία του έργου.

Είναι αξιοσημείωτο ακόμα πως η ακριβής καταγραφή όλων των σκέψεων και υπολογισμών ή βημάτων που ακολουθήθηκαν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την εξαγωγή συμπερασμάτων αλλά και αναπαραγωγή των διάφορων υπολογισμών ή πειραμάτων. Στο Log Book κάθε πληροφορία είναι χρήσιμη για την κατανόηση του τι έχει συμβεί ή για την επανάληψη κάποιας μέτρησης. Το logbook του έργου Nanocapillary περιέχει ένα πλήρες ιστορικό όλων των πειραμάτων που πραγματοποιήθηκαν καθώς και των αποτελεσμάτων τους.

Τηρείται κάθε μήνα με τα παρατηρούμενα δεδομένα και είναι μιας μορφής ημερολογίου μετρήσεων. Οι μετρήσεις γράφομαι άμεσα ελαχιστοποιώντας τον κίνδυνο παράληψης πειραματικών δεδομένων.

**Website**

Στην ιστοσελίδα θα αναρτώνται όλες οι σχετικές με το έργο Nanocapillary πληροφορίες (περιεχόμενο πράξης, δικτύωση και συνεργασίες, διάχυση αποτελεσμάτων), καθώς και όλο το υλικό και τα παραδοτέα που θα προκύψουν από την υλοποίηση των Δράσεων. Λαμβάνοντας υπόψη τη δυναμική του περιεχομένου της ιστοσελίδας (κατάλογοι και αρχεία που ανανεώνονται συχνά), θα ληφθεί μέριμνα για την άμεση υλοποίηση των απαραίτητων ανανεώσεων της ιστοσελίδας.

Η ιστοσελίδα θα πρέπει να διαθέτει επίκαιρο σχεδιασμό (design) σύμφωνα με πρότυπα ιστοσελίδων επαγγελματικού χαρακτήρα. Ο σχεδιασμός θα πρέπει να απεικονίζει το ρόλο και



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

τη χρησιμότητα του Προγράμματος. Θα ενσωματωθούν τα λογότυπα και τα πάσης φύσεως ενημερωτικά κείμενα (παρουσίαση του έργου, οργανόγραμμα κ.λπ.) που αφορούν το Πρόγραμμα και των λοιπών άμεσα συσχετιζόμενων με το πρόγραμμα.

Η ιστοσελίδα πληροί τις κάτωθι προδιαγραφές:

- Δυνατότητα πλήρους υποστήριξης περιβάλλοντος πολυμέσων για παρουσίαση
- Περιεχομένου σε ποικίλες μορφές
- Παρουσίαση των ερευνητικών ομάδων.
- Σελίδα με τα συνεργαζόμενα links (φορέων, εταίρων, υπουργείων κ.λπ.).
- Ανάρτηση δημοσιεύσεων
- Χρονοδιάγραμμα του έργου

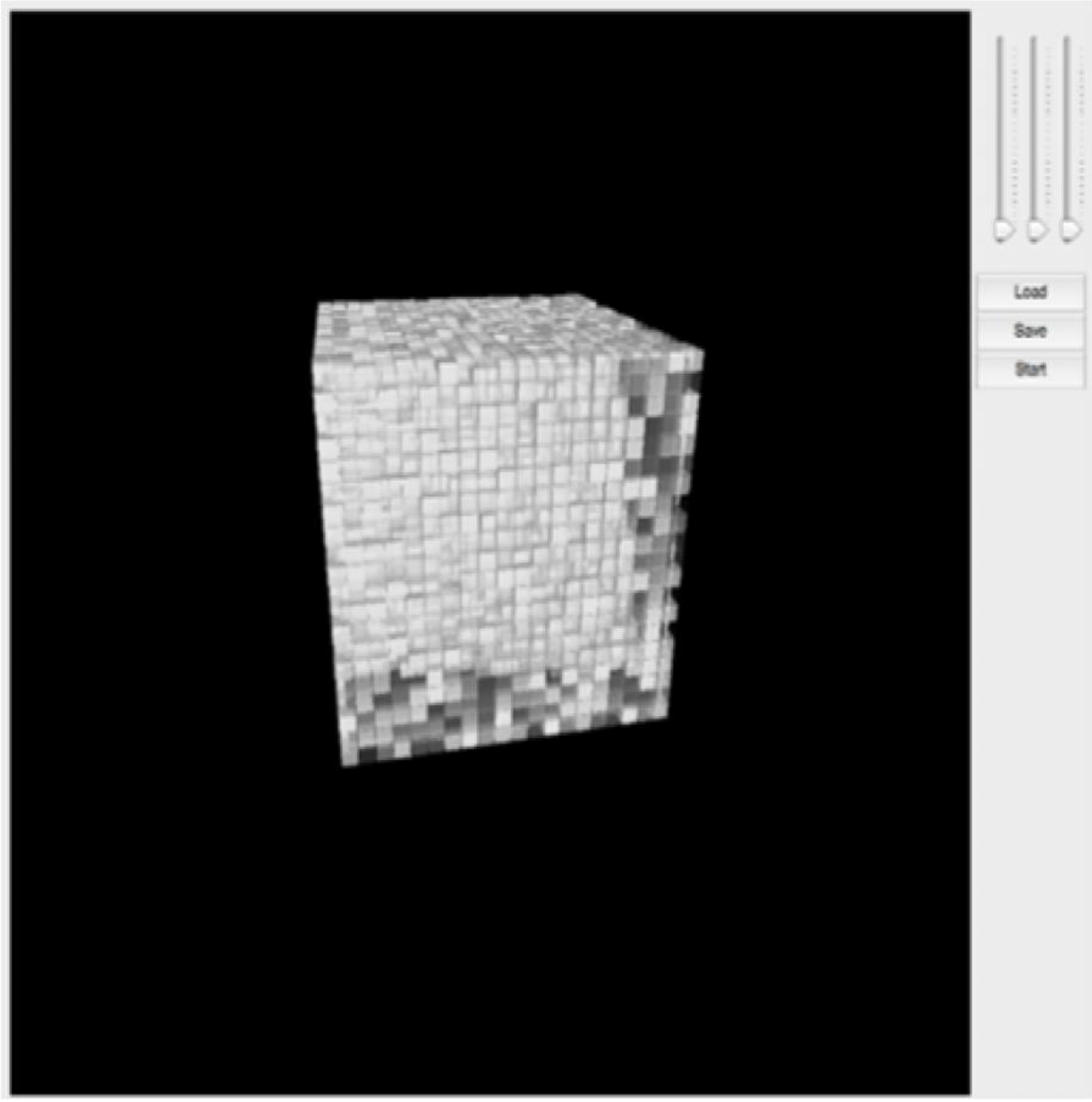
**Λογισμικό Nanocapillary**

Στο χρονικό διάστημα αυτό συνεχίστηκε η υλοποίηση του λογισμικού σε συνεργασία με τον Dr. J. W. Nolan, σε διαφορετικά τμήματα του κώδικα. Αναλυτικότερα βελτιώθηκε ο κώδικας που χρησιμοποιείται για να υπολογίσει την συνάρτηση κατανομής των ακτίνων των σωματιδίων (RDF). Ακόμα δημιουργήθηκαν διαφορετικά μοντέλα για την προσομοίωση τυχαίων σχηματισμών σωματιδίων και κρυσταλλικών υλικών τόσε σε κυβικές όσο και σε εξαεδρικές δομές. Για την επαλήθευση των μοντέλων χρησιμοποιήθηκε προσομοίωση του υλικού SBA – 15. Για τον ταχύτερο υπολογισμό των μοντέλων, αναπτύχθηκε καινούριος κώδικάς που στην πραγματικότητα υλοποιεί τους υπολογισμούς από το RDF στο I(q) (ένταση ακτινοβολίας), αυτό δίνει την δυνατότητα ποίο σύντομων υπολογισμών, χωρίς όμως να αλλοιώνεται το αποτέλεσμα. Τέλος κατά το ίδιο χρονικό διάστημα συνεχίστηκε η υλοποίηση της Βάσης Δεδομένων των υλικών.

Για την τρισδιάστατη γραφική απεικόνιση των υλικών δημιουργήθηκε ένα ειδικό προσάρτημα κώδικα σε PyOpenGL. Τα δεδομένα της δομής του υλικού φορτώνονται με την χρήση ενός προσαρτήματος loadtxt και αυτά πλέον αναπαριστώνται ως γραφικά με την χρήση του PyOpenGL. Το πλεονέκτημα αυτής της νέας προσέγγισης στην δημιουργία του κώδικά είναι ότι το τρισδιάστατο μοντέλο μπορεί να αναπαρασταθεί από όλες τις γωνίες του στον τρισδιάστατο χώρο. Τα δεδομένα αποτελούνται από 128X128X128 εικονοστοιχεία, δίνοντας με αυτό το τρόπο την δυνατότητα πιστότερης αναπαράστασης.

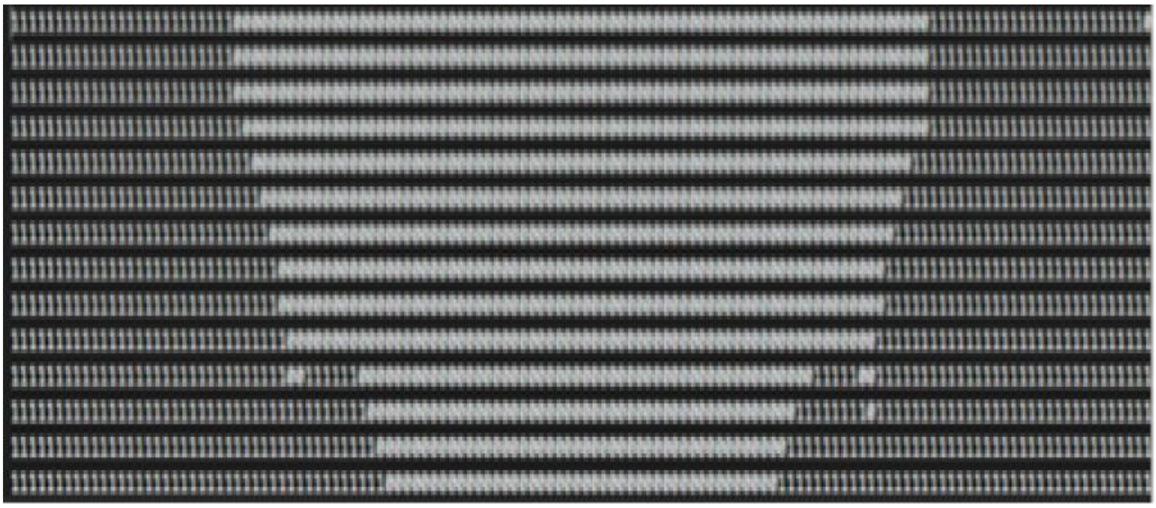


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



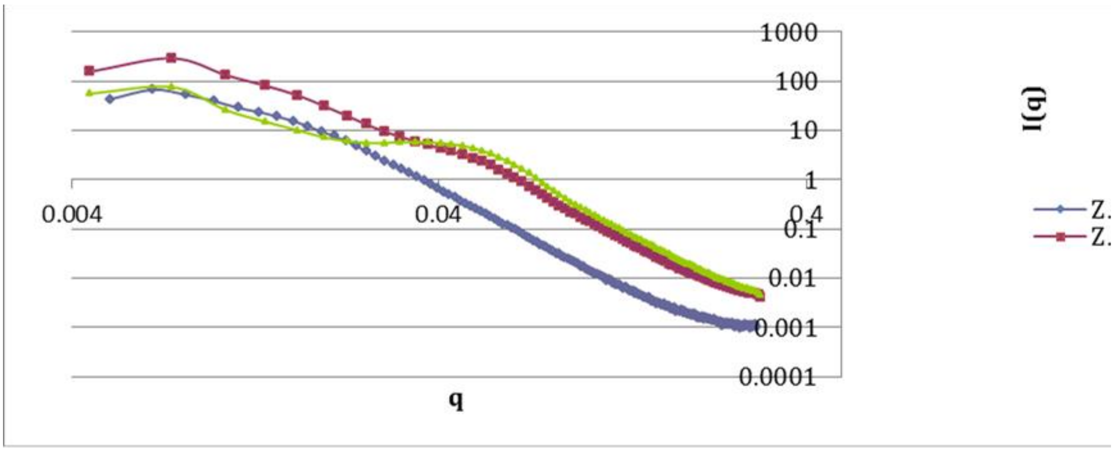



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Παράλληλα το ίδιο χρονικό διάστημα δημιουργήθηκε ένα προσάρτημα στο λογισμικό για την γραφική αναπαράσταση ενός πορώδους υλικού. Τα αρχικά βήματα που πραγματοποιούνται στο λογισμικό είναι η εισαγωγή μιας συνάρτησης συσχέτισης 2 σημείων και μιας CLD για την στοχαστική αναπαραγωγή των πορωδών υλικών. Η μερική κατανομή των υλικών αναπαράγεται ως συνάρτηση της φάσης $Z(x)$, όπου το $x$ είναι το άνυσμα θέσης σε μια αυθαίρετη θέση, και $Z(x) = 1$ αν το $x$ ανήκει σε πορώδες τμήμα και $Z(x) = 0$ αν το $x$ δεν ανήκει σε πορώδες τμήμα του υλικού. Το πορώδες του υλικού μπορεί να καθοριστεί ως ο μέσος όρος του $Z(x)$.

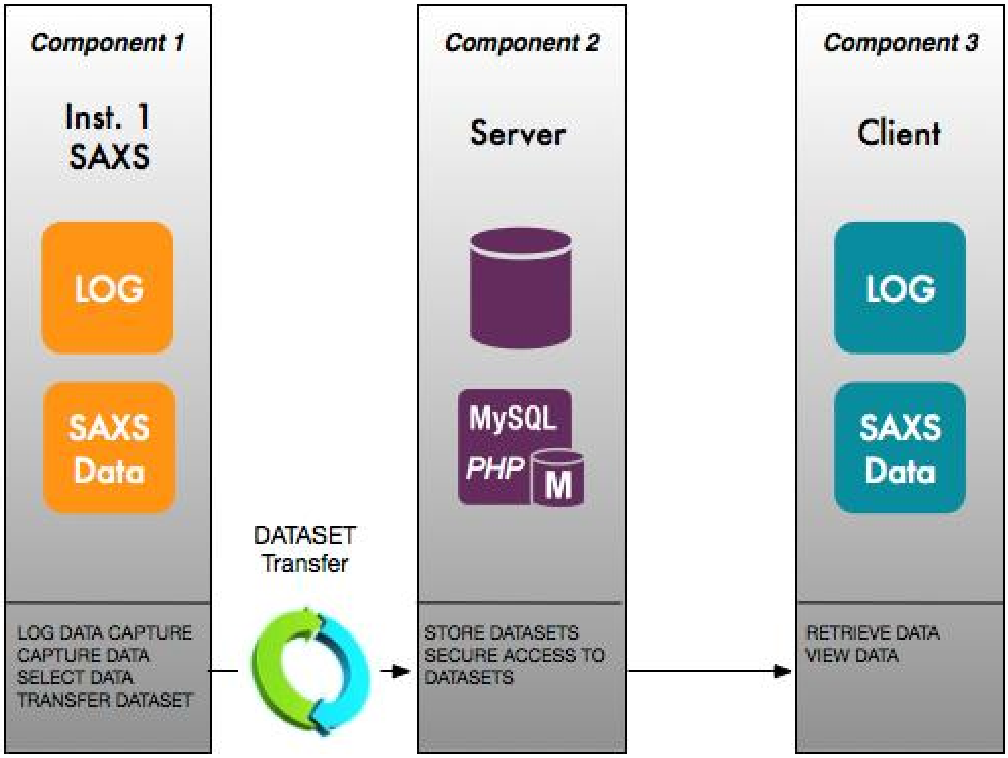
Πραγματοποιήθηκε ανάλυση δεδομένων και εξαγωγή αποτελεσμάτων για τον εμπλουτισμό της βάσης δεδομένων. Παρατίθεται παράδειγμα της εξαγωγής δεδομένων.





Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

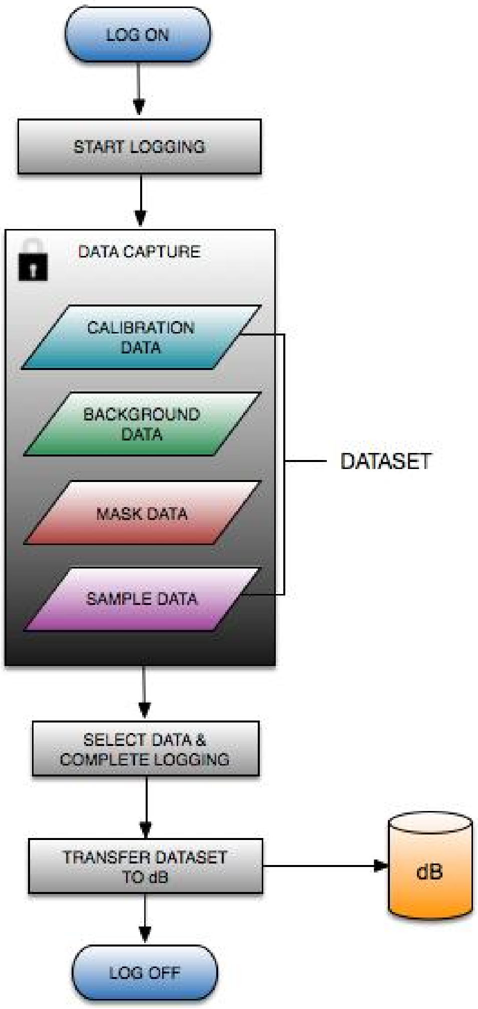
Δόθηκε ιδιαίτερη έμφαση στη βάση δεδομένων του λογισμικού. Βασικό κομμάτι είναι η αυτόματη αποθήκευση των δεδομένων που προκύπτουν κατά την εκτέλεση των πειραμάτων και η εισαγωγή τους στη Β.Δ. του λογισμικού. Για το λόγο αυτό δημιουργήθηκαν μια σειρά από scripts που θα υλοποιούν τη συγκεκριμένη διαδικασία και παρουσιάζονται στην εικόνα 1.




**Εικ. 1.** Διάγραμμα υλοποίησης αυτοματοποιημένης διαδικασίας εισαγωγής πειραματικών δεδομένων στο λογισμικό Nanocapillary.

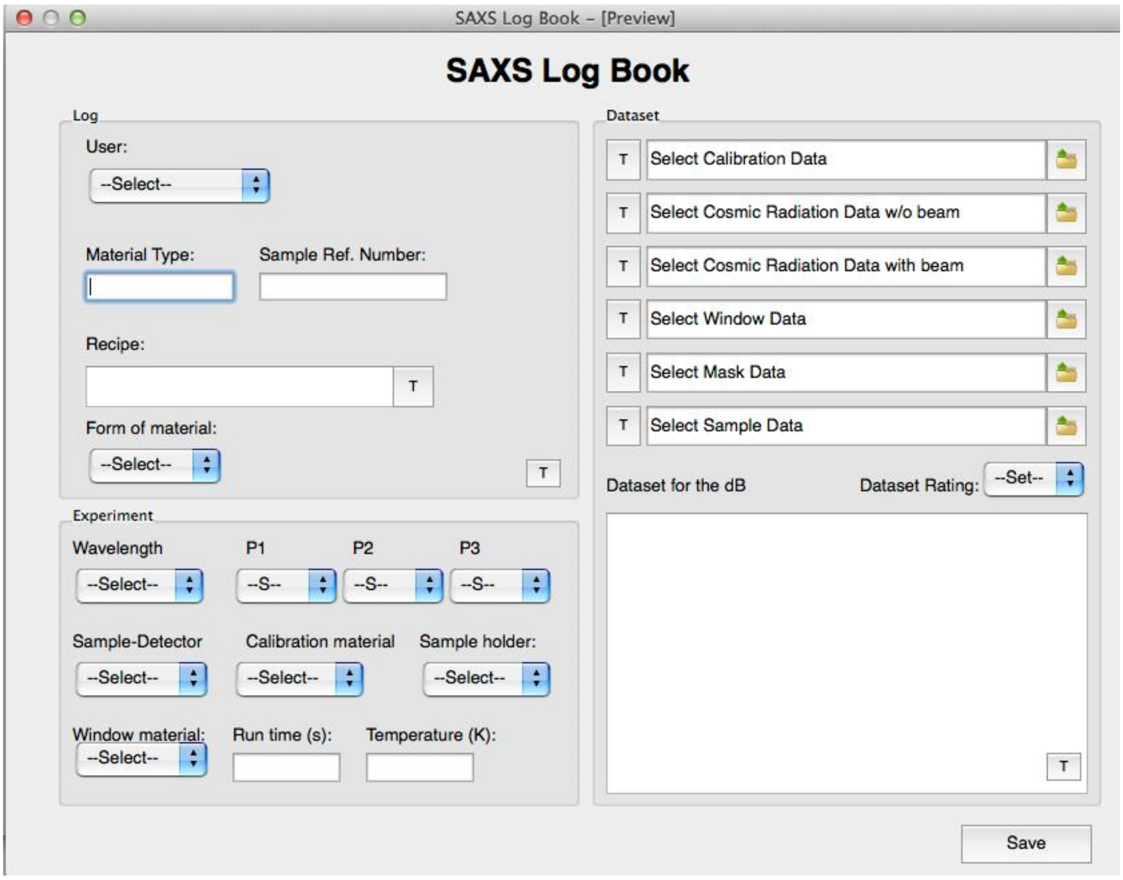
Όπως προκύπτει και από την εικόνα 1 το script αποτελείται από 3 στοιχεία. Στο 1 στοιχείο τα δεδομένα καταγράφονται από τον υπολογιστή του οργάνου (στην συγκεκριμένη περίπτωση από το όργανο του SAXS). Στο 2 στοιχείο τα δεδομένα εισάγονται στην MySQL βάση δεδομένων του λογισμικού και παράλληλα για την διαχείριση της, αναπτύχθηκε κέλυφος με php. Τέλος στο 3 στοιχείο υπάρχει μια τυπική διασύνδεση με τον τυπικό χρήστη, ο οποίος θα είναι σε θέση να ανακαλεί τα δεδομένα και να εξάγει όλες τις χρήσιμες πληροφορίες για αυτών.


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ




**Εικ. 2**. Λογικό διάγραμμα του 1ου στοιχείου καταγραφής και εισαγωγής δεδομένων.

Στην εικόνα 2 παρουσιάζεται η διαδικασία εισαγωγής των δεδομένων στην Β.Δ. Καταρχήν ο χρήστης του οργάνου θα πρέπει να εισέλθει στο interface του λογισμικού και να συμπληρώσει όλα τα απαραίτητα δεδομένα για την διαδικασία του πειράματος (παράμετροι ευθυγράμμισης οργάνου, δεδομένα κοσμικής ακτινοβολίας κ.α.). Αφού ολοκληρωθεί το πείραμα, ο χρήστης επιλέγει τα δεδομένα και τα εισάγει στην ΒΔ.

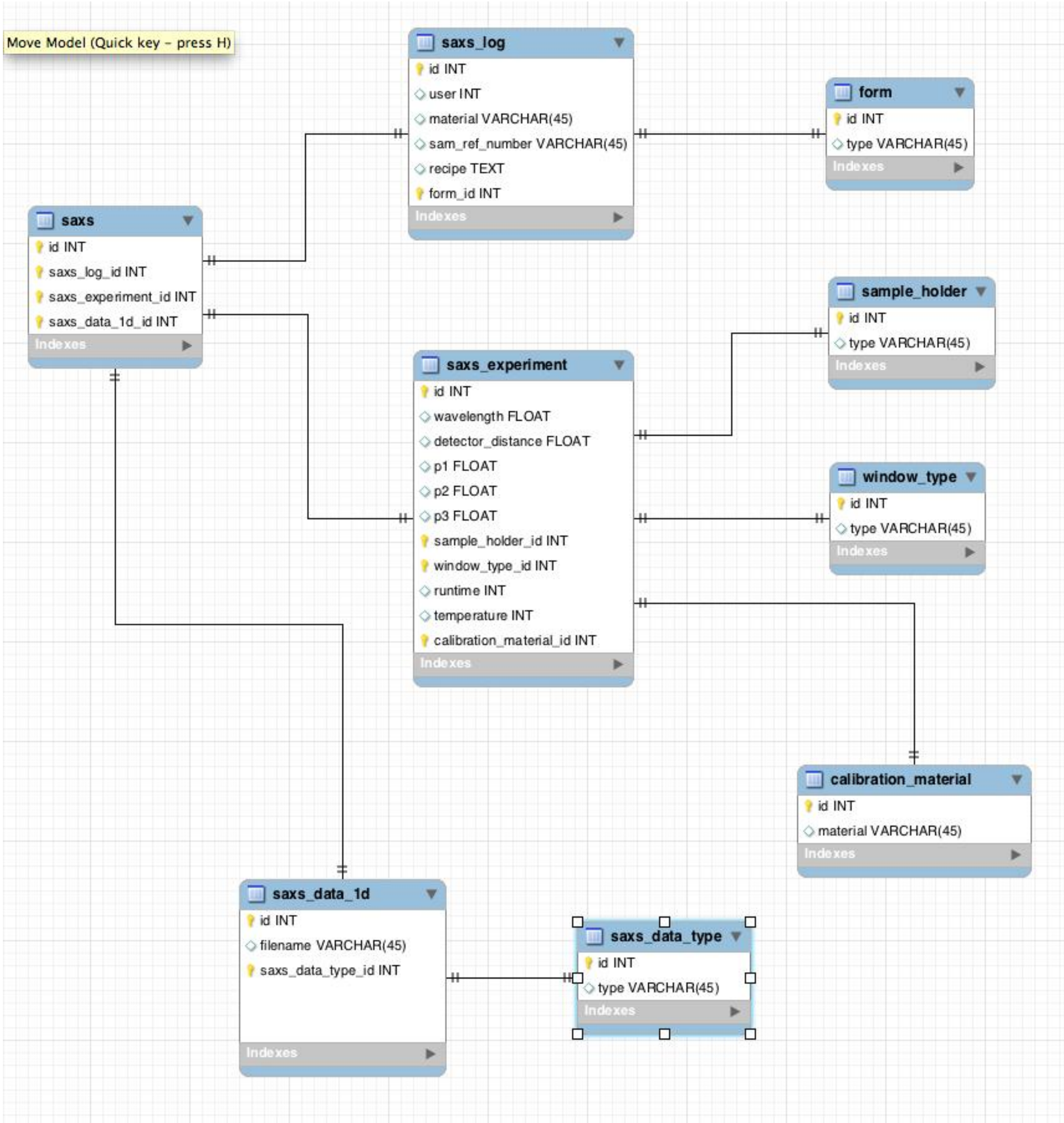



**Εικ. 3**. Το interface της καταγραφής των παραμέτρων του SAXS.

Στην εικόνα 3 παρουσιάζεται το interface για την εισαγωγή των παραμέτρων του πειράματος. Παρέχεται μια σειρά δεδομένων με σκοπό την αρτιότητα της καταγραφής σε βάθος χρόνου και χρήσης. Στην εικόνα 4 παρουσιάζεται μια αναλυτική δομή της διασύνδεσης των στοιχείων μεταξύ τους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




**Εικ. 4.** Η βασική δομή του backend της ΒΔ.

Τέλος στο ίδιο χρονικό διάστημα πραγματοποιήθηκαν οι εξής μετρήσεις στα πλαίσια των In – Situ Πειραμάτων.

- Αλλαγή του οργάνου στην μεγάλη διάταξη
- AgBeh (10h)


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

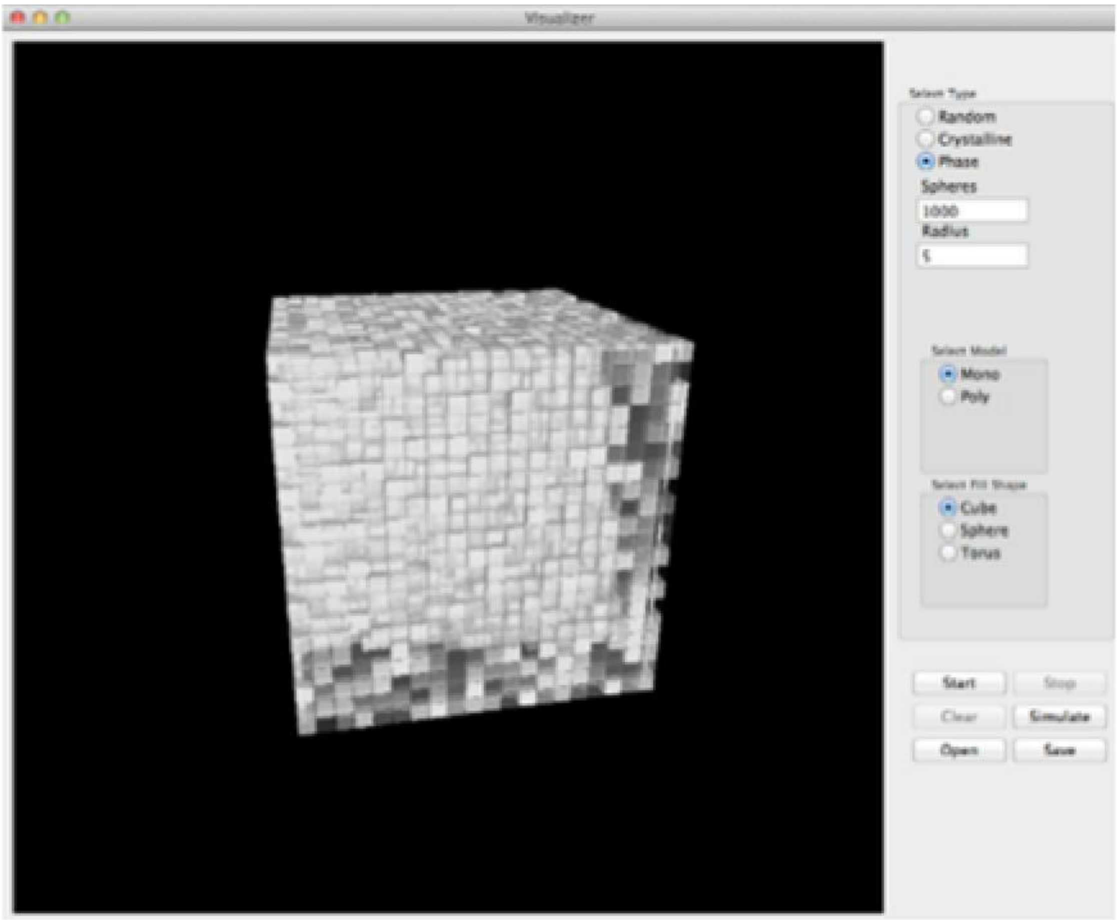
- Cosmic Radiation
- Mica Windows
- Empty Beam
- AgBeh Under Rotation
- Vycor
- Vycor Under Rotation
- Ch2Br2.
- NKLB1P12
- NKLB1P28
- NKLB1P29
- NKLB1P36
- NKLB1P37

Μετά την επιτυχή υλοποίηση των δυο πρώτων στατιστικών χαρακτηριστικών ενός υλικού που περιγράφεται μέσω μίας 2D εικόνας, το πορώδες (porosity) και την αυτοσυσχέτιση (autocorrelation), ολοκληρώθηκε ο υπολογισμός του φάσματος I(q) του υλικού σε συνεργασία με τον Δρ, Γ. Παπακώστα.

Επιπλέον, σε αυτό το χρονικό διάστημα ξεκίνησε η υλοποίηση της Στοχαστικής Ανακασκευής (Stochastic Reconstruction) του 3D μοντέλου του υλικού, βασιζόμενη στην πληροφορία που εντοπίζεται σε μία εικόνα 2D του υλικού. Η προς υλοποίηση μέθοδος περιγράφεται στην εργασία [1].



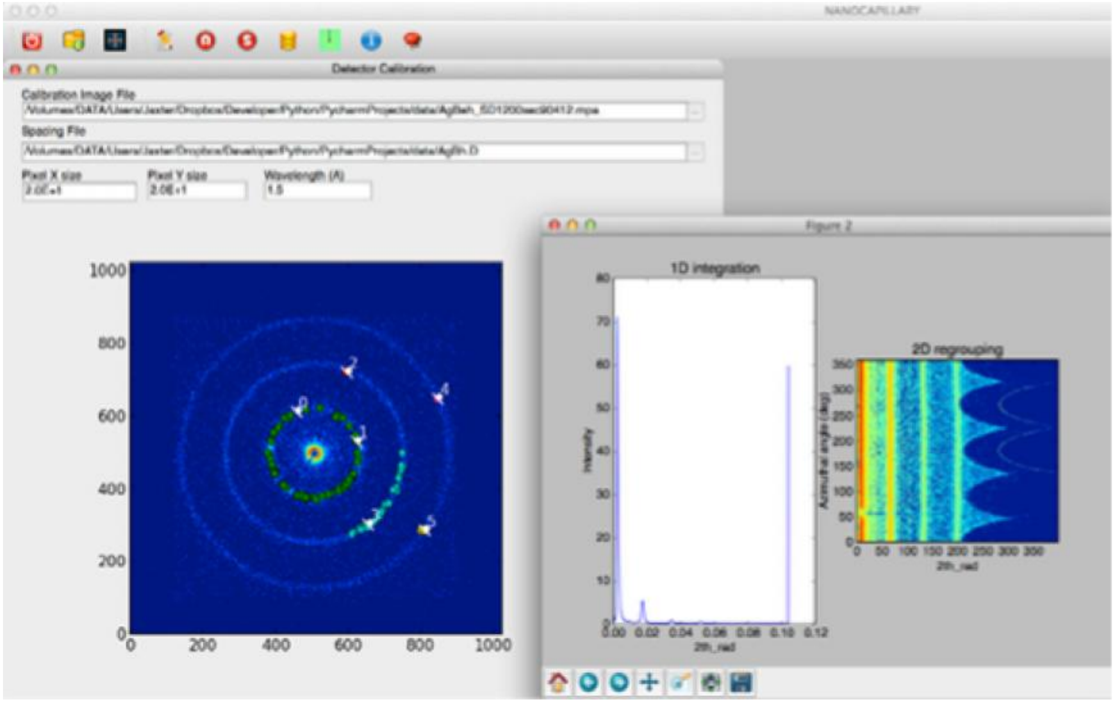
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Στα πλαίσια της προαναφερθήσας μεθοδολογίας ανακατασκευής, υλοποιήθηκαν τα εξής στάδια επεξεργασίας: 1) δημιουργία ενός τυχαίου (μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1) πληθυσμού σημείων στον 3D χώρο συντεταγμένων 2) υπολογισμός των ορθογώνιων πολυωνύμων Hermite, 3) υπολογισμός των συντελεστών που καθορίζουν την συμμετοχή του κάθε στοιχείου της συνάρτησης αυτοσυσχέτισης του 3D μοντέλου, στην συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της 2D αναπαράστασης του υλικού.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Η υλοποίηση του προαναφερθέντος λογισμικού έγινε σε περιβάλλον MATLAB για λόγους *γρήγορης προτοτυποποίησης* (rapid prototyping).

**Αναφορές**

**[1]** M.E. Kainourgiakis, E.S. Kikkinides, A.K. Stubos, "Diffusion and Flow in Porous Domains Constructed Using Process-Based and Stochastic Techniques", Journal of Porous Materials, vol. 9, no. 2, pp. 141-154, 2002

Μείζονος σημασίας η δοκιμή ανακατασκευής τρισδιάστατου μοντέλου πορώδους υλικού με την χρήση στοχαστικής ανακατασκευής σε συνεργασία με τον Δρ. Γ. Παπακώστα. Λόγω έλλειψης σημαντικών πληροφοριών αναφορικά με την επίλυση ενός μεγάλου αριθμού μη γραμμικών εξισώσεων που απαιτείται, αποφασίστηκε η αναστολή της υλοποίησης.

Εξαιτίας της προαναφερθήσας αδυναμίας, η ανάπτυξη του λογισμικού στράφηκε προς την επονομαζόμενη «Απλοποιημένη προσέγγιση των Joshi–Quiblier–Adler» (JQA). Η μέθοδος αυτή δεν απαιτεί την επίλυση του συστήματος εξισώσεων όπως η Στοχαστική Ανακατασκευή και αποτελείται από τα παρακάτω στάδια επεξεργασίας:



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. Δημιουργία ενός τυχαίου 3Δ μοντέλου $N(x, y, z)$ με την χρήση Gaussian θορύβου και του Box-Muller μετασχηματισμού.

2. Υπολογισμός της κανονικοποιημένης συνάρτησης αυτοσυσχέτισης

$$F(r) = F(x, y, z) = \frac{S_2\left(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right) - S_2(0)^2}{S_2(0) - S_2(0)^2}$$

   όπου $S_2(r)$ είναι η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης 2 σημείων της 2D εικόνας.

3. Ανακατασκευή του 3Δ μοντέλου μέσω συνέλιξης (φιλτράρισμα), ως ακολούθως:

$$R(x, y, z) = \sum_{i=0}^{c} \sum_{j=0}^{c} \sum_{k=0}^{c} N(x+i, y+j, z+k) \times F(i, j, k)$$

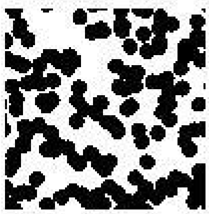
4. Εξομάλυνση της ανακατασκευασμένης 3D εικόνας (R) με χρήση Gaussian φίλτρου.

5. Επαναληπτική κατωφλίωση (thresholding) της προκύπτουσας εικόνας ώστε το προκύπτων 3D μοντέλο υλικού να έχει το ίδιο πορώδες (e) με το υλικό της 2D εικόνας.

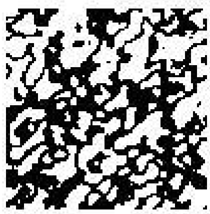
Η υλοποίηση του προαναφερθέντος λογισμικού έγινε σε περιβάλλον MATLAB για λόγους *γρήγορης πρωτοτυποποίησης* (rapid prototyping).

Κάποια πρόωρα αποτελέσματα ανακατασκευής φαίνονται στην παρακάτω **Εικόνα 1:**

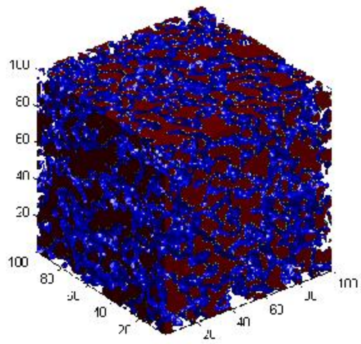

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α)



(β)



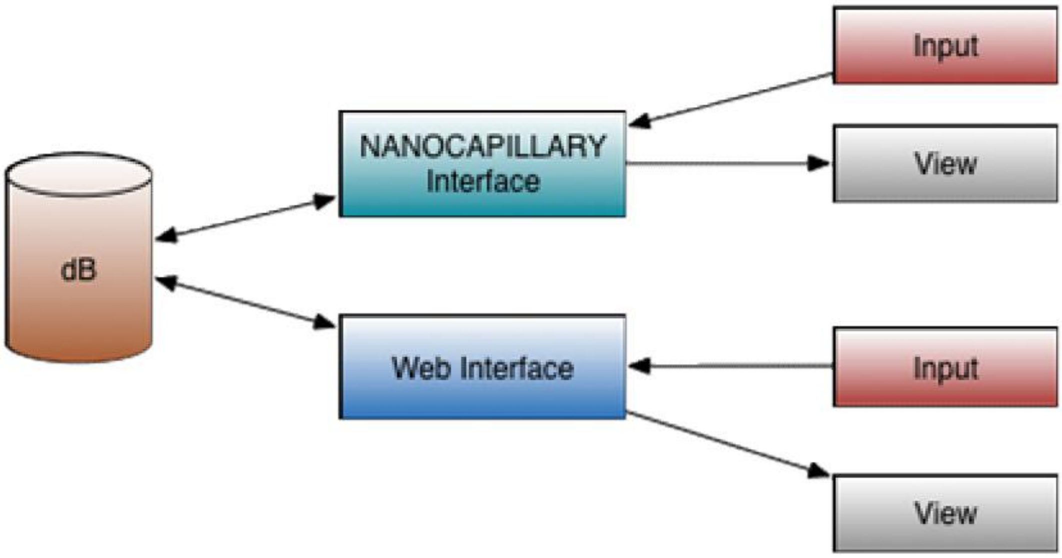
(γ)

**Εικόνα 1:** (α) Αρχική 2D εικόνα, (β) Τυχαία τομή του ανακατασκευασμένου 3D μοντέλου και (γ) Ανακατασκευασμένο 3D μοντέλου.

Η βάση δεδομένων αποτελείται από 2 διαφορετικές διεπαφές, έτσι ώστε να επιτυγχάνεται η πρόσβαση στα δεδομένα. Όπως φαίνεται στην εικόνα 1, υπάρχει η διεπαφή με το λογισμικό του Nanocapillary και επίσης η διεπαφή με το διαδίκτυο. Και στις δύο περιπτώσεις υπάρχουν οι δυνατότητες τόσο της εισαγωγής δεδομένων όσο και την εξαγωγής τους.

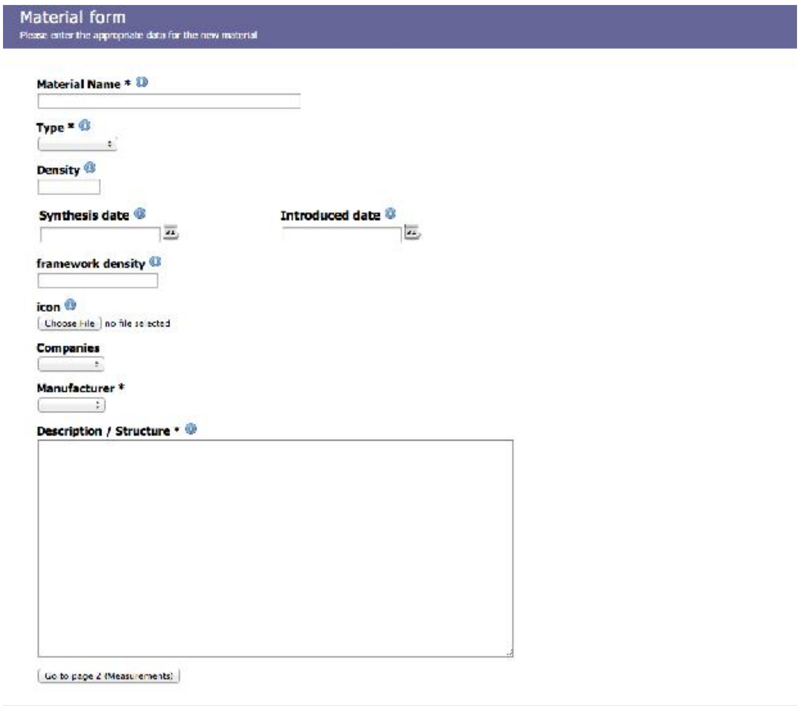


Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Εικ. 1. Σχηματικό διάγραμμα υλοποίησης της βάσης δεδομένων.

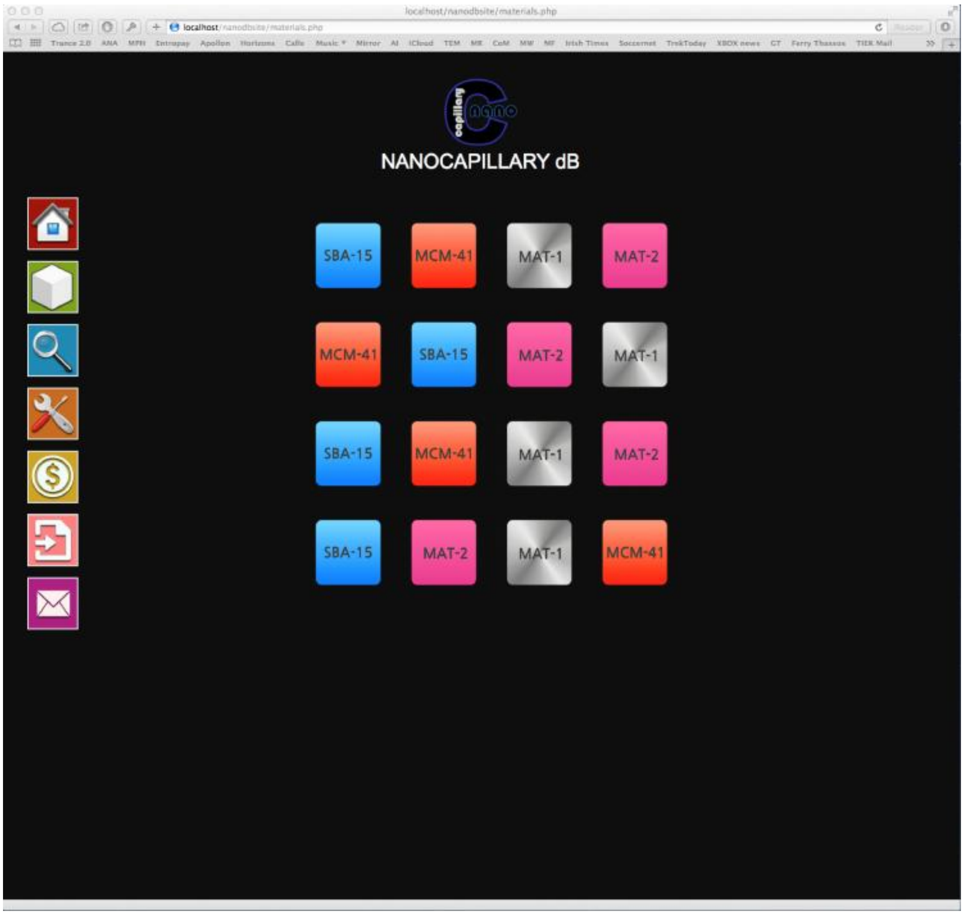
Για την ευκολότερη εισαγωγή των δεδομένων αναπτύχθηκε μια πλατφόρμα η οποία είναι διασυνδεδμένη με το διαδίκτυο. Ένα παράδειγμα φαίνεται στην εικόνα 2.




Εικ. 2. Φόρμα εισαγωγής των δεδομενων.


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

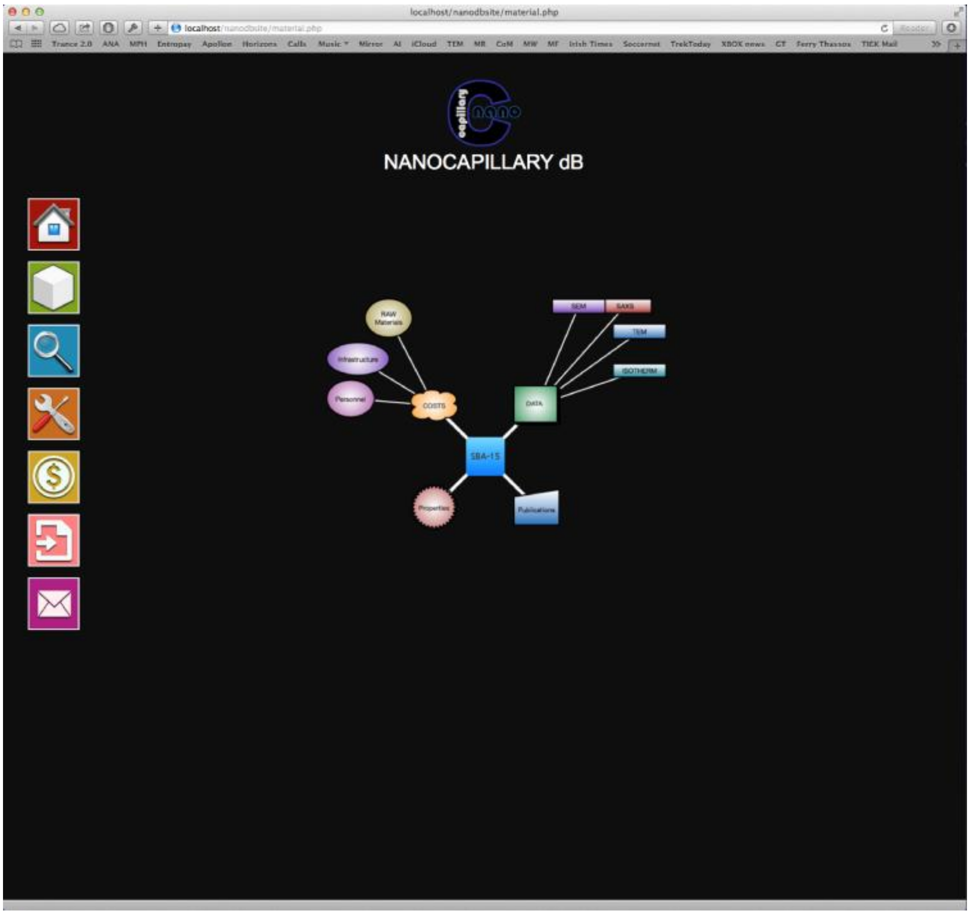
Στις εικόνες 3 και 4 παρουσιάζεται το interface για την πρόσβαση των δεδομένων και την προβολή των υλικών που είναι αποθηκευμένα στην βάση δεδομένων. Το interface υλοποιήθηκε με την χρήση Javascript σε συνδυασμό με την php και MySql.




Εικ. 3. Το διαδικτυακό interface της ΒΔ.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Εικ. 4. Το διαδικτυακό interface της ΒΔ.

Για την πληρότητα του λογισμικού, εκτός από τηνν χρήση του προτύπου AgBeh, εισάχθηκαν στο λογισμικό και μετρήσεις νερού. Το νερό είναι απαραίτητο για τον υπολογισμό της absolute intensity, λόγω του ότι έχει χαρακτηριστικό φάσμα. Με την χρήση του AgBeh στο λογισμικό επιτυγχάνεται ο καθορισμός της γεωμετρίας του οργάνου ενώ με την χρήση του νερού επιτυγχάνεται η αρτίοτητα της μέτρησης με την γνώση της απόλυτης έντασης εκτινοβολίας του οργάνου. Επίσης εισάχθηκαν στην βάση δεδομένων μετρήσεις από δειγματοφορείς. Ο λόγος χρήσης των προαναφερθέντων φασμάτων είναι για την αφαίρεση του background. Για την ακρίβεια χρησιμοποιήθηκαν φάσματα από τα ακόλουθα:

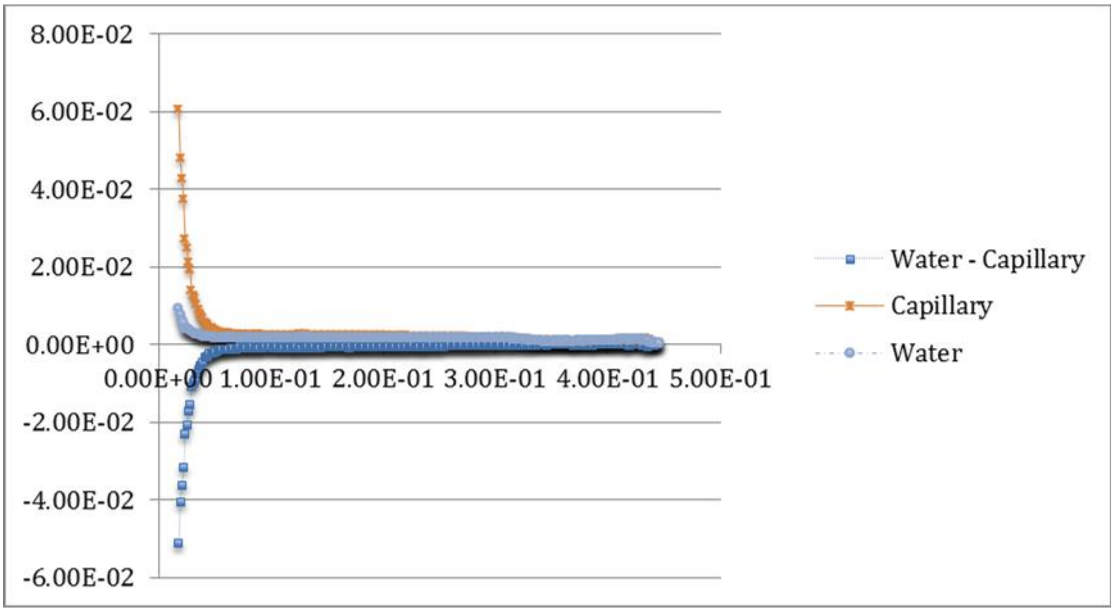
- mica



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

- capillaries
- campton
- tapes
- CR ( για διαφορετικούς χρόνους)

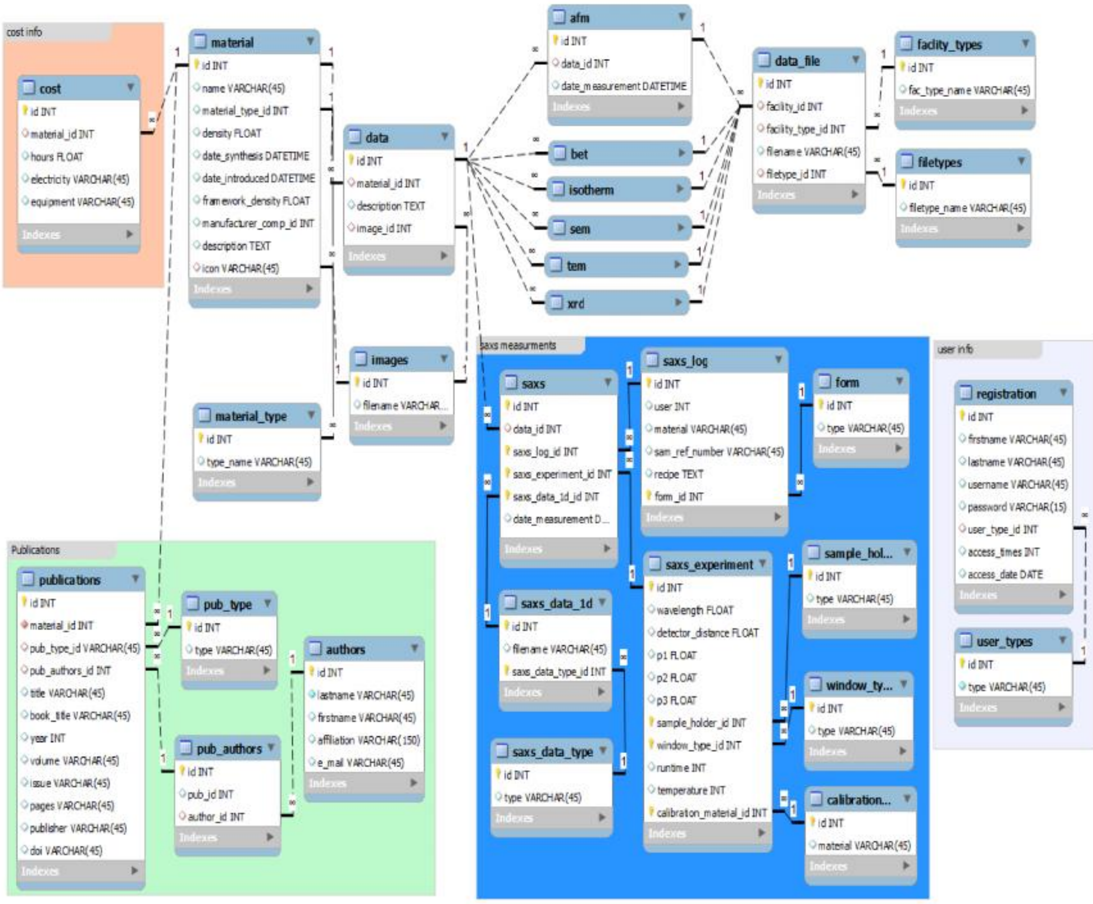
Φάσματα από νερό και capillary.




Η βάση δεδομένων αργότερα βελτιώθηκε έτσι ώστε να περιλαμβάνει περισσότερες πληροφορίες για πορώδη υλικά. Επίσης, για την πληρότητα της βάσης δεδομένων, αυξήθηκε ο αριθμός των υλικών που μπορούν να αποθηκευτούν στην βάση δεδομένων. Στην εικόνα 1, παρουσιάζεται η διασύνδεση των πεδίων της βάσης δεδομένων όπως προέκυψε από την βελτίωση της.



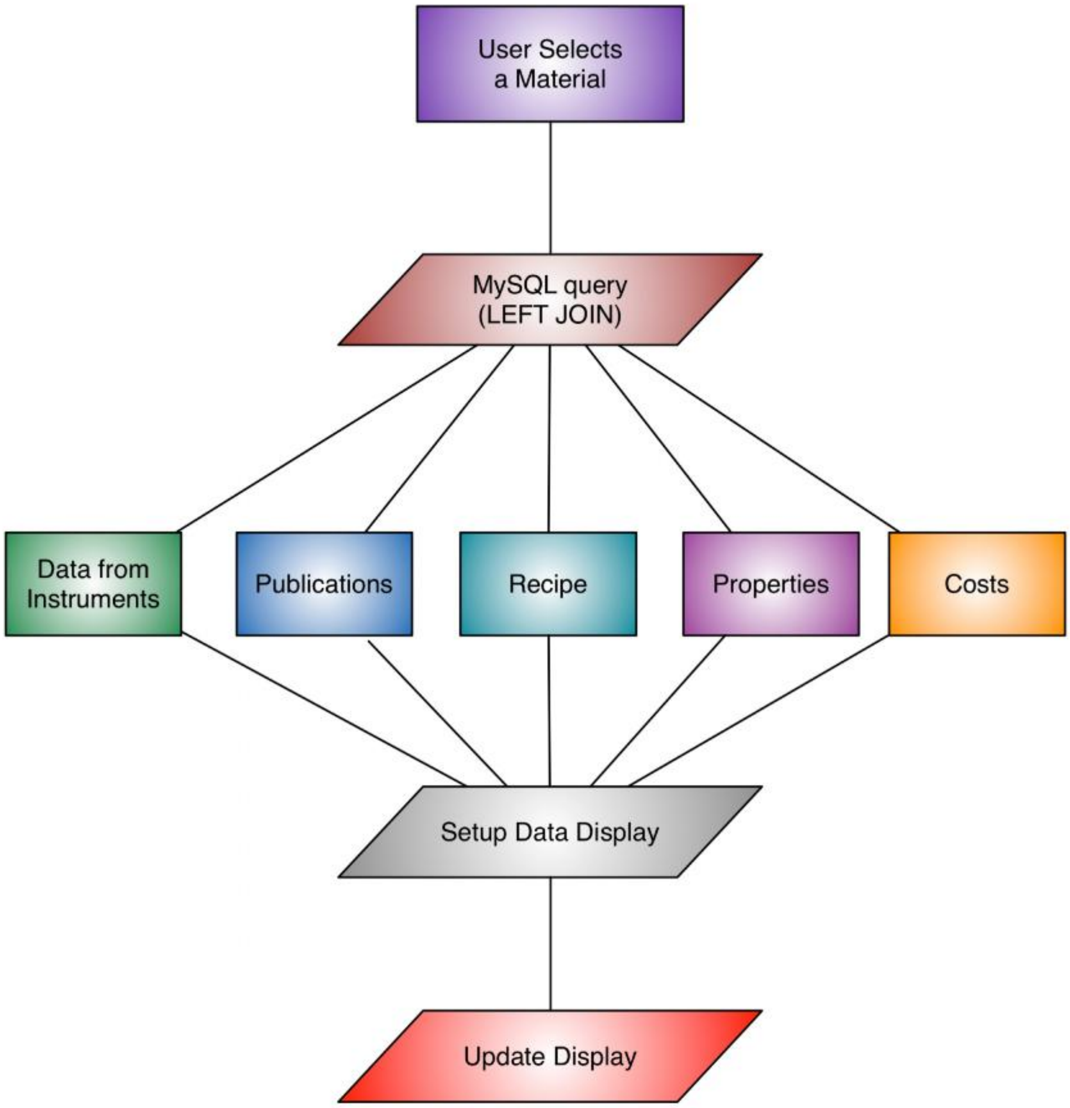
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Εικ. 1. Το διάγραμμα της βελτιωμένης βάσης δεδομένων.

Δημιουργήθηκαν, με την χρήση php, νέα script για την ανεύρεση πληροφοριών από την βάση δεδομένων, έτσι ώστε εκτός από την ταχύτερη ανάκτηση πληροφοριών να παρουσιάζονται γραφικά τα δεδομένα των υλικών στον χρήστη. Όπως παρουσιάζεται στην εικόνα 2, όταν ένας χρήστης επιλέγει ένα υλικό στο γραφικό περιβάλλον, ένα script που έχει δημιουργηθεί με την χρήση php, δημιουργείται ένα ερώτημα για να παρουσιάστουν δεδομένα υλικών από την ίδια κατηγορία, όπως «συνταγές», ιδιότητες, σχετικές δημοσιεύσεις κ.α. Έπειτα ένα script php, παρουσιάζει τα δεδομένα, όπως αυτά παρουσιάζονται στην εικόνα 3, τα οποία παρουσιάζονται στον τελικό χρήστη με την βοήθεια της javascript και HTML 5.

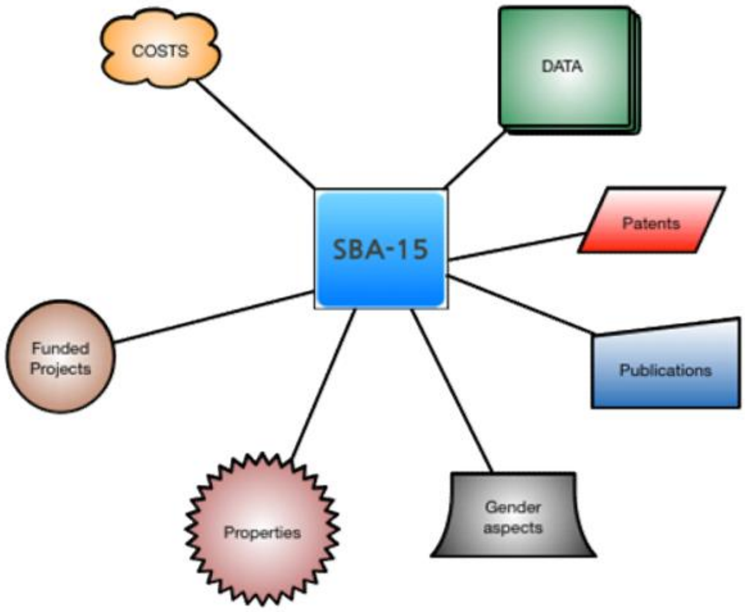

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ




Εικ 2. Γραφική αναπαράσταση των PHP, MySQL και JavaScript scripts που χρησιμοποιούνται για την παρουσίαση των δεδομένων στο χρήστη.



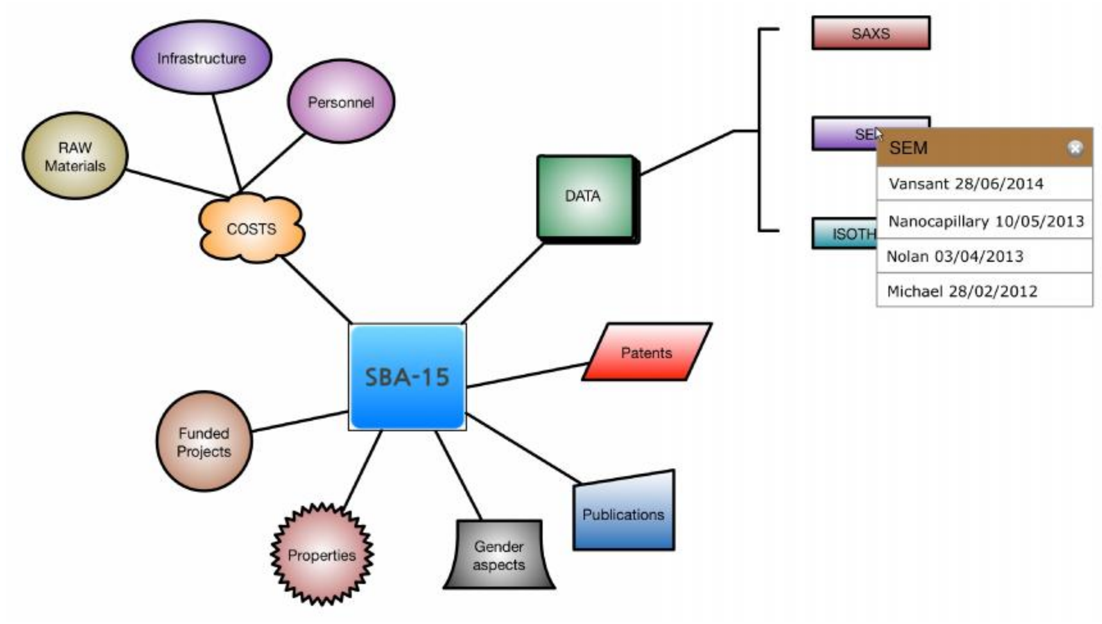
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Εικ 3. Παράδειγμα παρουσίασης δεδομένων

Επιπρόσθετα, τροποποιήθηκε ο αλγόριθμος εύρεσης δεδομένων, έτσι ώστε κατά την χρήση του να επιστρέφει πειραματικά δεδομένα από κάθε υλικό, κατηγοριοποιημένα ανάλογα με το τύπο του οργάνου που έχουν συλλεχθεί. Επιπλέον, όταν ο χρήστης, μετακινεί την συσκευή κατάδειξης στην οθόνη του υπολογιστή του, πάνω από μια σχετική τεχνική, παρουσιάζονται μια σειρά δεδομένων για την συγκεκριμένη τεχνική. Ο χρήστης, με αυτή τη μέθοδο μπορεί να επιλέξει τα δεδομένα που του είναι απαραίτητα. Η διαδικασία αυτή πραγματοποιείται με την χρήση ασύγχρονης Javascript και XML (Alax). Όταν ο χρήστης μετακινεί την συσκευή κατάδειξης πάνω από μια τεχνική, μια εντολή της Javascript καλεί ένα αρχείο PHP, το οποίο με τη σειρά του ψάχνει τη βάση δεδομένων. Τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την χρήση της εντολής εύρεσης, παρουσιάζονται σε ένα πίνακα και ένα αναδυόμενο παράθυρο εμφανίζεται έτσι ώστε να ενημερώσει το χρήστη με τα δυνατά αποτελέσματα εικόνα 1.


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης




Εικόνα 1. Παρουσίαση αποτελεσμάτων της βελτιωμένης τεχνικής αναζήτησης δεδομένων στη βάση.

Χρησιμοποιήθηκε η Fabric,JS HMTL5 JavaScript Canvas Library, με σκοπό να δοθούν στη βάση δεδομένων περισσότερες δυνατότητες γραφικής αναπαράστασης. Η ένταξη της άνωθι βιβλιοθήκης υλοποιήθηκε με την εγκατάσταση του λειτουργικού Linux σε δοκιμαστικό διακομιστή με Apache, PHP και MySQL και των σχετικών προγραμμάτων Node.js (http://nodejs.org), node-canvas (https://github.com/Automattic/node-canvas) and Cairo (http://cairographics.org). Το jQuery χρησιμοποιείται για ταχύτερη ανάπτυξη του κώδικα. Ένα πρόσθετο jQuery το οποίο ονομάστηκε bpopup (http://dinbror.dk/bpopup/) χρησιμοποιείται για να παρουσιάσει πληροφορίες από τη βάση δεδομένων.

Το αρχείο Fabric,JS αναπτύχθηκε για να παρουσιάζει τα δεδομένα με αποτελεσματικότερο τρόπο, όταν αυτά καλούνται από την βάση δεδομένων. Όταν ο χρήστης θα τοποθετεί τον δείκτη σε ένα αντικείμενο της βάσης δεδομένων, τότε ανοίγει ένα αναδυόμενο παράθυρο που παρουσιάζει στον χρήστη όλες τις απαραίτητες πληροφορίες. Πολλά επίπεδα πληροφοριών καθίστανται ορατά στον χρήστη και δύνεται επίσης η δυνατότητα να τα ανακατανέμει με απλή χρήση του δείκτη έτσι ώστε να παρουσιάζονται εύκολα όλες οι πληροφορίες από την βάση δεδομένων.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

**Δημοσιεύσεις**

Στο σχεδιασμό του έργου προβλέφθηκε επίσης μια ενότητα εργασίας η οποία αφορά αποκλειστικά ενέργειες δημοσιότητας και διάχυσης των ερευνητικών αποτελεσμάτων.

**International Conferences:**

1. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, A. Vairis, J. W. Nolan and A. Ch. Mitropoulos, "*In situ SAXS investigation of dibromomethane adsorption in ordered mesoporous silica*", Eighth International Symposium Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids, $27^{th}$ – $31^{st}$ August, 2012, Krakow, Poland, Proceedings, pp. 238–239.
2. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, S. K. Papageorgiou, J. W. Nolan and A. Ch. Mitropoulos, "*In situ small angle x-ray scattering and benzene adsorption in carbon hollow fiber membranes*", Eighth International Symposium Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids, $27^{th}$ – $31^{st}$ August, 2012, Krakow, Poland, Proceedings, pp. 240–242.
3. Evangelos P. Favvas, Konstantinos L. Stefanopoulos, Nikolaos Ch. Vordos and Athanasios Ch. Mitropoulos, "*In situ SAXS study of adsorption in porous glass including hysteresis scanning measurements*", $11^{th}$ International Conference on the Fundamentals of Adsorption (FOA), $19^{th}$ – $24^{th}$ May, 2013, Baltimore, USA.
4. E.P. Favvas, K.L. Stefanopoulos, N.Ch. Vordos, G.I. Drosos, A.Ch. Mitropoulos, "*Characterization of calcium sulfate bone graft substitutes by porosimetry methods*", $6^{th}$ Panhellinic Conference of Porous Materials, $9^{th}$–$10^{th}$ September, **2013**, Cavala, Greece.
5. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, N. Ch. Vordos, A. Ch. Mitropoulos, "*Dibromomethane adsorption on mcm-41 by in situ saxs*", $6^{th}$ Panhellinic Conference of Porous Materials, $9^{th}$ – $10^{th}$ September, **2013**, Cavala, Greece.
6. J. W. Nolan, D. Gkika, N. Vordos, E. P. Favvas, A. Ch. Mitropoulos, "*The NANOCAPILLARY Software for Analysis, Simulation and Cataloging of Small Angle X-Ray Scattering data*", $6^{th}$ Panhellinic Conference of Porous Materials, $9^{th}$ – $10^{th}$ September, **2013**, Cavala, Greece.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

7. K. D. Karakosta, E. P. Favvas, E. P. Kouvelos, N. C. Kokkinos, A. Ch. Mitropoulos, R. Nickolov, "*A study of domain theory on Vycor glass*", 6th Panhellinic Conference of Porous Materials, 9th – 10th September, **2013**, Cavala, Greece.

8. D. A. Gkika, P. Cool , E. F. Vansant, J. W. Nolan, N. Vordos, E. P. Favvas and A. Ch. Mitropoulos, "*How much do nanomaterials cost?*", 6th Panhellinic Conference of Porous Materials, 9th – 10th September, **2013**, Cavala, Greece.

9. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, N. Ch. Vordos, A. Ch. Mitropoulos, "*In situ $CH_2Br_2$ adsorption and SAXS measurements in MCM-41*", 10th International Symposium on the Characterization of Porous Solids (COPS-X), 11-14 May, **2014**, Granada, Spain.

**Peer reviewed journals:**

10. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, S. K. Papageorgiou and A. Ch. Mitropoulos "*In situ small angle x-ray scattering and benzene adsorption in carbon hollow fiber membranes*", Adsorption 19, **2013,** 225–233.

11. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, A. Vairis, J. W. Nolan, K. D. Joensen and A. Ch. Mitropoulos, "*In situ SAXS investigation of dibromomethane adsorption in ordered mesoporous silica*", Adsorption 19, **2013**, 331–338.

**Peer reviewed journals (*Under Review*):**

12. Evangelos P. Favvas, Konstantinos L. Stefanopoulos, Nikolaos Ch. Vordos, George I. Drosos, Athanasios Ch. Mitropoulos, "*Structural study of bone graft substitute calcium sulfate cements by porosimetry, diffraction and microscopy*", J. Amer. Ceram. Soc. **2014**, ***under review***.

13. Evangelos P. Favvas, Evangelos P. Kouvelos, Sergios K. Papageorgiou, Constantinos G. Tsanaktsidis, Athanasios Ch. Mitropoulos "*Natural resin polymer: A promising material for $H_2O$ adsorption process. A performance study and a structural characterization evaluation*", Polymer Testing, **2014**, ***under review***.

14. E. P. Favvas, K. L. Stefanopoulos, N. Ch. Vordos, A. Ch. Mitropoulos, N. K. Kanellopoulos, "*In situ SAXS study of dibromomethane adsorption on MCM-41*", Microp. Mesop. Mater. **2014**, ***under review***.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. A.Ch. Mitropoulos, Small-angle X-ray scattering studies of adsorption in Vycor glass, J.Coll.Interface Sci. 336, 679-690 (2009).
2. H.P.Hood and M.E.Norberg, treated borosilicate glass, U.S.Patent (1938) 2,106,744.
3. A.Zsigmondy, Z. Anorg. Chem. 71 (1911) 356.
4. P.Levitz, G.Ehret, S.K.Sinha, and J.M.Drake, Porous Vycor glass: The microstructure as probed by electron microscopy, direct energy transfer, small-angle scattering, and molecular adsorption, J.Chem.Phys. 95 (1991) 6151-6161.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης