

Structuur en dynamica van polymeren (E068900)

Cursusomvang (nominale waarden; effectieve waarden kunnen verschillen per opleiding)

Studiepunten 6.0

Studietijd 180 u

Aanbodsessies en werkvormen in academiejaar 2024-2025

A (semester 1)	Nederlands	Gent	excursie	5.0u
B (semester 1)	Engels	Gent	excursie hoorcollege practicum	

Lesgevers in academiejaar 2024-2025

De Clerck, Karen	TW11	Verantwoordelijk lesgever
D'hooge, Dagmar	TW11	Medelesgever

Aangeboden in onderstaande opleidingen in 2024-2025

	stptn	aanbodsessie
Brugprogramma Master of Science in Sustainable Materials Engineering	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Control Engineering and Automation)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Electrical Power Engineering)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Maritime Engineering)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Construction)	6	B
Master of Science in Electromechanical Engineering (afstudeerrichting Mechanical Energy Engineering)	6	B
Master of Science in Chemical Engineering	6	B
Master of Science in de ingenieurswetenschappen: chemische technologie	6	A
Master of Science in de ingenieurswetenschappen: materiaalkunde	6	A
Master of Science in Sustainable Materials Engineering	6	B

Onderwijstalen

Engels, Nederlands

Trefwoorden

Polymeerkristalliniteit, smeltgedrag, oriëntatie, (thermo)dynamica van polymeren in oplossing/smelt, reologie, viscoelasticiteit, fasescheiding, relaties structuur en eigenschappen van polymeer, ketendimensies, Flory-Huggins parameter, polymeerfysica, Poiseuille-stroming, mechanische eigenschappen, moleculaire interactie, simulatie van polymeerstroming in basisgeometrieën.

Situering

Gedetailleerde studie van de basisconcepten aangaande de structuur en (thermo)dynamica van polymeren en polymeeroplossingen (inclusief smelt), rekening houdend met verschillende lengteschalen en zowel experimentele karakterisatie en modelleringstechnieken.

Voor wat de structuur van polymeren betreft wordende de volgende aspecten bestudeerd: semi-kristalliniteit, kristalliniteit, smeltgedrag, oriëntatie en de relatie tussen structuur en eigenschappen. Voor wat de (thermo)dynamica van polymeren betreft worden behandeld: segment/solvent interacties, diffusie en basisstromingsgedrag (smelt en oplossing). Belangrijke aspecten worden tevens toegelicht via gevallenstudies.

Inhoud

- Inleiding tot polymeerfysica en verschillende lengteschalen voor polymeren
- Nanoschaal: mathematische beschrijving afstand tussen uiteinden en gyrationstraal
 - Ideaal geval: vrij-gebonden/Gaussiane ketens
 - Uitbreiding 1: bindingshoek en restricties voor korte bereik
 - Uitbreiding 2: restricties voor lange bereik met nadruk op belang bestuderen thermodynamische eigenschappen
 - Uitbreiding 3: moleculaire dynamica: Lennard Jones potentiaal en Coulomb-bijdrage
- Micro- en macroschaal
 - Overzicht van de belangrijkste polymeereigenschappen (b.v. gemiddelde molaire massa, wrijving, elastisiteit, kristalliniteit, viscoelasticiteit, ...) die later in detail behandeld worden in het opleidingsonderdeel
 - Belang in een bredere context van polymeerverwerking: basisconcepten
- Thermodynamische eigenschappen
 - Vereenvoudigd geval van ideale oplossing: hoofdtheorie
 - Gibbs vrije energie voor menging
 - Belang van temperatuur en samenstelling
 - Uitbreiding tot polymeeroplossingen: Flory-Huggins theorie
 - Gibbs vrije energie voor menging
 - Chemische potentiaal voor solvent en polymeer
 - Speciaal geval van verdunde oplossingen: concept van thetacondities
 - Vergelijking met methode van oplosbaarheidsparameters
 - Fasescheiding: concept van vervang chemische potentiaal: spinodale lijne en coexistentiecurve
- Aantal gemiddelde molaire massa als basiseigenschap
 - Definitie
 - Relate tussen Flory-Huggins theorie en parameters onder verdunde condities
 - Membraanosometrie
 - Densitometrie
- Wrijfingeigenschappen
 - Intrinsieke viscositeit
 - Definitie
 - Mathematische beschrijvingen: Huggins vergelijking, Kramer vergelijking, and Mark-Houwink-Sakurada vergelijking
 - Uitbreiding tot diffusiviteit van monomeer/solvent/polymeermengsels
 - Cohen and Turnbull basisvergelijking
 - Vrentas and Duda vrije volume theory: gedetailleerde beschrijving
- Fasestructuur en morfologie
 - Amorfe toestand
 - Glasoverdracht
 - Factoren die de glastransitietemperatuur beïnvloeden
 - Kristallijne toestand
 - Bepaling van de kristallijne structuur
 - Polymeer "single-crystals"
 - Semi-kristallijne polymeren
 - Vloeistof-kristallijne polymeren
 - Defecten
 - Kinetiek voor kristallisatie en moleculaire mechanismen
 - Smelten: differentiële scanning calorimetrie (DSC) en factoren die de smelttemperatuur beïnvloeden
 - Relatie tussen glastransitie- en smelttemperatuur
- Elastische vervorming
 - Spanning en rek: algemene aspecten
 - Vervorming van polymeerketens en polymeer kristal moduli
- Yield en crazing
 - Yield: algemene aspecten
 - Yield criteria: Tresca, Von Mises and drukafhankelijkheid
 - Mechanisme voor vervormen
 - Crazing: craze yielding en criteria
- Breuk en vertaaien
 - Fundamentele aspecten van breuk: theoretische treksterkte en proces van

- moleculaire falen
- Mechanica van falen: brosse en ductiele breuk
- Breukfenomenen
- Vertaalde polymeren
- Viscoelastische eigenschappen en reologisch gedrag
- Basismodellen gebaseerd op constante rek of spanning
 - Limiteringen van de modellen (b.v. Maxwell and Voigt model)
 - Uitbreiding tot Boltzmann superpositieprincipe
- Dynamisch testen om polymeereigenschappen in te schatten
 - Frekwentieafhankelijkheid van het viscoelastisch gedrag
 - Overgangen en polymeerstructuur
 - Tijd-temperatuur superpositie
 - Invloed van verstrengelingen
 - Hoofddechnieken voor reologische metingen
- Fundamentele aspecten van polymeerstroming
 - Keteflexibiliteit en diffusiviteit in smelt
 - Behoudswetten voor het beschrijven van transport in isotherme polymeersmelten: massa en impuls
 - Effect van afschuifsnellheid op de belangrijkste reologische eigenschappen
 - Stromingspatroon van polymeersmelten in basisgeometrieën: Poiseuille stroming
 - Uitbreiding voor multicomponentsystemen: basisprincipes
 - Uitbreiding voor reactieve polymeerstroming: basisprincipes
 - Indicatie van belang naar polymeerverwerking op industriële/macroschaal, inclusief belang van ontwerp "die" (basisprincipes)
- Gevallestudies
 - Electrospinnen: principe en beschrijving ketendimensies
 - Constructie van thermodynamisch diagram voor medicijn-polymeer systeem
 - Performantie van polymeergebaseerde zonnecellen
 - Vereenvoudigde beschrijving van polymeerverwerkingseenheden
 - gecombineerde sleep en drukstroming voor extrusie
 - niet-parallelle vlakke plaat sleepstroming voor productie deklagen
 - Bepaling van viriale vergelijking van een standaardpolymeer
 - DSC and XRD voor kristalliniteit bij vezels
 - Vertaaling via polymeercomposieten
 - Evaluatie van polymeer/solvent affiniteit en intrinsieke viscositeit van polyelectrolyten

Begincompetenties

Dit opleidingsonderdeel bouwt voort op basiskennis van organische chemie en polymeren

Eindcompetenties

- 1 Kennis: beschrijven en definiëren van de volgende concepten; amorfe en semi-kristallijne polymeren; kristallijne toestand/smeltgedrag; oriëntatie; structuur-eigenschap-relaties; polymeren in oplossing; polymeerreologie; multicomponentsystemen; diffusie van polymeermoleculen
- 2 Vaardigheden: het in staat zijn van het relateren van de microstructuur van het polymeer aan de polymeereigenschappen, het begrijpen van de Flory-Huggins parameter in het beschrijven van moleculaire interacties, het begrijpen van het effect van procescondities zoals temperatuur en druk op de diffusiviteit van polymeren in smelt en oplossing, het kunnen relateren van de microstructuur en polymeerdynamica met de basisstappen van polymeerverwerking, het kunnen beschrijven van isotherme polymeerstroming in basisgeometrieën gebruik makend van de behoudswetten voor massa en impuls, het herkennen van de relevantie van de verschillende lengteschalen voor moleculaire interacties.
- 3 Attitude: het in staat zijn om problemen in het vakgebied structuur en dynamica van polymeren zelfstandig en in groep op te lossen.

Creditcontractvoorwaarde

Toelating tot dit opleidingsonderdeel via creditcontract is mogelijk na gunstige beoordeling van de competenties

Examencontractvoorwaarde

Dit opleidingsonderdeel kan niet via examencontract gevolgd worden

Didactische werkvormen

Werkcollege, Excursie, Hoorcollege, Practicum

Toelichtingen bij de didactische werkvormen

begeleide zelfstudie, practica,

Excursie: een bedrijfsbezoek wordt voorzien op voorwaarde dat dit mogelijk blijkt voor het bedrijf en de lesplanning.

Studiemateriaal

Type: Slides

Naam: Structuur en dynamica van polymeren

Richtprijs: Gratis of betaald door opleiding

Optioneel: nee

Taal : Engels

Beschikbaar op Ufora : Ja

Online beschikbaar : Nee

Beschikbaar in de bibliotheek : Nee

Beschikbaar via studentenvereniging : Nee

Bijkomende info: Alle slides en ondersteunende handouts worden ter beschikking gesteld via Ufora

Referenties

zie leermateriaal

Vakinhoudelijke studiebegeleiding

Evaluatiemomenten

periodegebonden en niet-periodegebonden evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de eerste examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij periodegebonden evaluatie in de tweede examenperiode

Mondelinge evaluatie, Schriftelijke evaluatie

Evaluatievormen bij niet-periodegebonden evaluatie

Presentatie, Werkstuk

Tweede examenkans in geval van niet-periodegebonden evaluatie

Examen in de tweede examenperiode is enkel mogelijk in gewijzigde vorm

Toelichtingen bij de evaluatievormen

Periodegebonden evaluatie: theorie: mondeling examen met gesloten boek, schriftelijke voorbereiding; oefeningen; schriftelijk examen met gesloten boek
Niet-periodegebonden evaluatie: rapport of presentatie van de werkstukken

Eindscoreberekening

Periodegebonden evaluatie: 16/20 met 14 punten (theorie) en 2 punten (oefeningen)

Niet-periodegebonden evaluatie: 4/20