



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΡΕΥΣΤΟΜΗΧΑΝΙΚΗΣ & ΣΤΡΟΒΙΛΟΜΗΧΑΝΩΝ

Δευτέρα 20/02/2017-Ωρα 12:00

Αίθουσα τηλεδιασκέψεων Τμ. Μηχανικών Χωροταξίας

Δημόσια Υποστήριξη Διδακτορικής Διατριβής

«ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ & ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΣΤΑΤΙΚΗΣ ΑΠΟΚΡΙΣΗΣ ΜΙΚΡΟΦΥΣΑΛΙΔΩΝ ΜΕ ΕΛΑΣΤΙΚΟ ΚΕΛΥΦΟΣ ΣΕ ΟΜΟΙΟΜΟΡΦΑ ΚΑΙ ΚΑΤΑΝΕΜΗΜΕΝΑ ΦΟΡΤΙΑ-ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΤΗΝ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΠΑΡΑΜΕΤΡΩΝ ΤΟΥ ΚΕΛΥΦΟΥΣ»

Αλκμήνη Λύτρα, Μηχανολόγος Μηχανικός-ΜΔΕ, ΠΘ

Επιβλέπων: Καθηγητής Νίκος Πελεκάσης

Περίληψη

Στην παρούσα διδακτορική διατριβή μελετάται θεωρητικά και υπολογιστικά η στατική απόκριση φυσαλίδων τύπου contrast agent. Το ελαστικό περίβλημα που τις καλύπτει είναι βιο-συμβατό και παρέχει μηχανική αντοχή καθιστώντας τις κατάλληλες για εφαρμογές, όπως η στοχευμένη διανομή φαρμάκου και απεικόνιση παθολογικών ιστών (in-vivo). Ο χαρακτηρισμός των ιδιοτήτων του κελύφους, μέτρο ελαστικότητας και μέτρο κάμψης, είναι κεντρικής σημασίας για την βέλτιστη λειτουργία τους. Δύο βασικοί τύποι κελυφών συναντώνται σε αυτές τις εφαρμογές: Μικροφυσαλίδες επικαλυμμένες με πολυμερές και μονές στοιβάδες λιπιδίου. Η στατική τους απόκριση καθορίζεται από δύο αδιάστατες παραμέτρους που συγκρίνουν την σχετική ακαμψία μεταξύ θλίψης/εφελκυσμού και κάμψης, $\hat{k}_b = k_b / (\chi R_0^2)$, και μεταξύ συμπίεστος και θλίψης/εφελκυσμού, $\hat{P}_A = (P_A R_0) / \chi$, όπου R_0 η ακτίνα της φυσαλίδας. Οι πρώτες χαρακτηρίζονται από υψηλότερο μέτρο ελαστικότητας και αντίσταση σε κάμψη σε σχέση με τις δεύτερες και κατά συνέπεια σχετικά μικρότερες τιμές της \hat{k}_b και αμελητέα \hat{P}_A .

Τα τελευταία χρόνια το μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (AFM) έχει αναδειχθεί ως ένα σημαντικό εργαλείο για την εκτίμηση των παραπάνω ιδιοτήτων μέσω καμπυλών δύναμης-παραμόρφωσης. Στην παρούσα διατριβή αρχικά παρουσιάζεται ένα θεωρητικό και αριθμητικό μοντέλο για την περιγραφή της επαφής του προβόλου του AFM με το κέλυφος. Σε αυτό το πλαίσιο προτείνονται δύο προσεγγίσεις. Η πρώτη είναι ένα απλοποιημένο μοντέλο επαφής, όπου θεωρεί ότι όλη η δύναμη είναι συγκεντρωμένη στην άκρη της επαφής, ενώ στην δεύτερη λαμβάνεται υπόψη ο υδρόφιλος χαρακτήρας αυτών των κελυφών. Σε κάθε περίπτωση επιλύονται μέσω πεπερασμένων στοιχείων οι εξισώσεις ισορροπίας των ελαστικών τάσεων και η εξίσωση ισοθερμοκρασιακής συμπίεσης του αερίου στην αξονοσυμμετρική τους μορφή. Οι ελαστικές τάσεις περιγράφονται από καταστατικούς νόμους (Hook, Mooney-Rivlin, Skalak) και η σταδιακή λέπτυνση του υγρού φιλμ από την

πίεση απόσχισης (disjoining pressure). Σύγκριση με ανάλογα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας αναδεικνύει την αξιοπιστία της αριθμητικής μεθοδολογίας. Τα αποτελέσματα και των δύο μοντέλων παρουσιάζονται κυρίως σε καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης, ενώ παράλληλα μελετάται το παραμορφωμένο σχήμα και το ενδεχόμενο λυγισμού στην περιοχή της επαφής. Παρουσιάζεται εκτενής παραμετρική μελέτη για τη κατανόηση της επίδρασης των όρων της ελαστικότητας του κελύφους, της συμπιεστότητας του αερίου που εσωκλείεται και εξετάζονται περιπτώσεις σημαντικής προσκόλλησης στον πρόβολο. Οι πειραματικές καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης για μικροφυσαλίδες καλυμμένες από πολυμερές αρχικά παρουσιάζουν γραμμική συμπεριφορά και στη συνέχεια μη γραμμική με τα κοίλα προς τα κάτω, ενώ στις φυσαλίδες καλυμμένες από λιπίδιο η συμπεριφορά είναι σχεδόν γραμμική και στη συνέχεια οριακά μη γραμμική με τα κοίλα προς τα πάνω. Για το πρώτο είδος φυσαλίδων ο συνδυασμός των σχέσεων Reissner (γραμμική) και Pogorelov (μη γραμμική) μπορεί να εκτιμήσει ταυτόχρονα το μέτρο ελαστικότητας και το πάχος του κελύφους, τα οποία βρίσκονται σε πολύ καλή συμφωνία με πειραματικές εκτιμήσεις. Για την εκτίμηση των ελαστικών ιδιοτήτων των κελυφών από λιπίδιο προτείνεται μία νέα μέθοδος συνδυάζοντας την σχέση Reissner με μία νέα από την περιοχή που κυριαρχεί η εσωτερική πίεση. Αριθμητικές προσομοιώσεις με παραμέτρους αυτές που υπολογίστηκαν προηγουμένως ανακτούν την πειραματική συμπεριφορά και των δύο τύπων κελυφών.

Το δεύτερο πρόβλημα που μελετάει η παρούσα διατριβή είναι ο στατικός λυγισμός των παραπάνω φυσαλίδων υπό την επίδραση ομοιόμορφου κάθετου φορτίου και η χάραξη των διαγραμμάτων διακλάδωσης. Επιλύονται οι ίδιες εξισώσεις, αλλά για γνωστό εξωτερικό φορτίο και η αριθμητική μεθοδολογία έχει ελεγχθεί συγκρίνοντας με παρόμοια αριθμητικά αποτελέσματα, ενώ ανακτάται η τιμή του κρίσιμου φορτίου λυγισμού που προβλέπεται από την θεωρία. Η βασικός κλάδος χαρακτηρίζεται από συμπιεσμένες σφαίρες. Όταν το φορτίο γίνει ίσο με το κρίσιμο, αλλάζει η ευστάθεια του ιακωβιανού πίνακα και νέοι κλάδοι λύσεων προκύπτουν που χαρακτηρίζονται από ασύμμετρα ή συμμετρικά ως προς τον ισημερινό σχήματα (λυγισμός). Οι ασύμμετροι κλάδοι αναπτύσσονται μόνο υποκρίσιμα (subcritical bifurcation), δηλαδή για τιμές χαμηλότερες του κρίσιμου φορτίου λυγισμού, ενώ οι συμμετρικοί τόσο σε μεγαλύτερες, όσο και σε μικρότερες (transcritical bifurcation). Οι υποκρίσιμοι κλάδοι παρακολουθούνται μέχρι την ένωση των δύο πόλων σε σχετικά χαμηλούς όγκους, ιδιαίτερα για πολυμερικά κελύφη λόγω της αμελητέας \hat{P}_A , μετά την παρουσία κρίσιμου σημείου στον κλάδο (limit point). Η παραμετρική μελέτη δείχνει ότι σε κελύφη με σχετικά μεγάλη αντίσταση σε κάμψη η πρώτη αστάθεια κυριαρχείται από συμμετρικά, ενώ καθώς αυτή μειώνεται, μείωση \hat{k}_b , η πρώτη αστάθεια έχει ασύμμετρα σχήματα και με περαιτέρω μείωση περνάμε πάλι σε συμμετρικά. Αυτή η αλληλουχία στην πρώτη αστάθεια συμβαίνει για λόγους μείωσης της συνολικής ενέργειας, καθώς αλλάζει η σχετική σημασία της αντίστασης σε κάμψη σε σχέση με την αντίσταση σε εφελκυσμό/θλίψη και παρατηρείται και στους δύο τύπους κελυφών. Ταυτόχρονα μελετάται εκτενώς η συνολική ενέργεια και ο αριθμός των ασταθών ιδιοτιμών, ώστε να χαρακτηριστεί η ευστάθεια κάθε λύσης σε συνδυασμό και με αντίστοιχες δυναμικές προσομοιώσεις.