

Materiaaleigenschappen worden vaak bepaald door voor het blote oog onzichtbare structuren. Bij het chemische bedrijf ICI bijvoorbeeld, worden studies gedaan naar geluidsisolatie in auto's.²²¹ De structuur van het gebruikte isolatiemateriaal (poly-urethaan- of pur-schuim) wordt hier zo aangepast dat het specifieke geluidsfrequenties tegenhoudt. (Poly-urethaan is een polymeer materiaal. Polymeren zijn de bouwstenen van kunststoffen zoals plastics, synthetische vezels en rubbers.) Een computer berekent wat voor inwendige structuur en daarmee stijfheid, het schuim moet hebben om een bepaalde frequentie te blokkeren. De structuur van het schuim wordt beïnvloed door het polymerisatieproces (het maken van de polymeren) te sturen. De polymerisatietijd, het moleculaire gewicht van de ketens en het aantal verbindingen daartussen zijn variabel. Deze stap - het bepalen van het productieproces dat moet leiden tot een specifieke schuimstructuur - kan echter nog niet met een computer worden gedaan. Dit gebeurt nu nog op basis van jarenlange ervaring van wetenschappers met het maken en bewerken van poly-urethaan. De structuren in het pur-schuim zijn een gevolg van een aantal verschillende fenomenen, waaronder microfase scheiding en reacties.

Poly-urethaan wordt in erg grote hoeveelheden gemaakt en verkocht, omdat het een heel scala aan gunstige eigenschappen, zoals slijtvastheid, elasticiteit en sterkte, bezit. Omdat het polymeer bestaat uit flexibele delen, afgewisseld met stijvere delen (het polymeer is semi-kristallijn), combineert het eigenschappen van rubber met eigenschappen van andere makkelijk verwerkbaar polymeren. De semi-kristalliniteit van het materiaal zorgt ervoor dat er op microschaal gebiedjes gevormd worden waar de stijvere delen oplijnen. Hier wordt het materiaal dus stugger. De afwisseling van deze gebiedjes met flexibeler stukken bepaalt het gedrag van het materiaal. De schuimen die zo gemaakt worden, worden niet alleen in de auto-industrie gebruikt, maar bijvoorbeeld ook verwerkt in ski's, auto-spoilers, tennis rackets en warmte-isolatie. Al deze verschillende toepassingen van één materiaal worden mogelijk gemaakt door het variëren van de condities waaronder het materiaal gemaakt en verwerkt wordt. Welke microstructuur precies ontstaat in het schuim is van groot belang omdat het op grotere lengte schalen bepaalt wat de materiaal eigenschappen van het schuim zullen zijn.

Nu gaat het in mijn proefschrift niet over poly-urethaan. Het onderzoek dat in dit proefschrift wordt beschreven moet uiteindelijk leiden tot een gereedschap in de vorm van een computerprogramma. Dit programma kan een chemisch ingenieur gebruiken om van te voren te bepalen

hoe een polymeer materiaal, zoals bijvoorbeeld het hierboven beschreven poly-urethaan, moet worden gemaakt en verwerkt zodat een materiaal met een specifieke microstructuur en gedrag, zoals het pur-schuim, in grote hoeveelheden kan worden geproduceerd.

Om tot zo'n computerprogramma te komen moet er wel het één en ander gebeuren. Het eigenlijke programmeren is hier een onderdeel van dat het rekenmodel omzet naar instructies die de computer begrijpt. Het onderzoek voor dit proefschrift bouwt voort op een bestaand model voor het beschrijven van microfase scheiding in polymeer vloeistoffen; de 'dynamische dichtheids functionaal theorie'. Het mooie van deze theorie is dat er niet erg veel van tevoren verondersteld is, waardoor het flexibel is en een goed uitgangspunt vormt voor het toepasbaar maken van het model op bijvoorbeeld de pur-schuimen. Om zo'n specifiek materiaal en alles wat ermee gebeurt in het verwerkingsproces goed te kunnen representeren is het belangrijk om zowel het molecuul en zijn eigenschappen als de verwerkingsprocessen op een goede manier te beschrijven. Daarnaast moet het 'papieren' model vertaald worden naar een computermodel zodat de computer het model ook inderdaad uitrekent (Hoofdstukken 3 en 4).

De andere hoofdstukken in dit proefschrift vertellen hoe het materiaal en de verwerkingsprocessen op een goede manier in het model kunnen worden beschreven. Van belang is bijvoorbeeld om de samendrukbaarheid van het materiaal (Hoofdstuk 5), de manier waarop de moleculen in een vloeistof zich voortbewegen (Hoofdstuk 6) en het verband tussen een uitwendige vervorming (rekken of schuiven) van het systeem en de inwendige gevolgen hiervan (Hoofdstuk 7) goed te beschrijven. Een uitbreiding van het model zodat de gevolgen van stroming op grote schaal in het systeem beter beschreven worden staat in Hoofdstuk 8. Hoofdstuk 9 tenslotte beschrijft een voorstel om reologische eigenschappen van polymeer vloeistoffen (ongewone stromingsverschijnselen ten gevolge van de speciale samenstelling) beter te representeren.

Al deze uitbreidingen van de dynamische dichtheids functionaal theorie hebben ertoe geleid dat de methode nu echt toepasbaar is op praktijk problemen. Bovendien kan het aantal praktische, industriële toepassingen ervan in de nabije toekomst nog veel groter worden (Hoofdstuk 10).

In 1994 begon ik aan dit promotieonderzoek. De methode die zou leiden tot MesoDyn bestond eigenlijk nog maar net in zijn meest ruwe vorm en zowel Hans als Bernard waren een jaar eerder begonnen met hun werk op de RuG. Het project CAESAR was toegekend door de EG, met daarbij een postdoc voor twee jaar voor Hans. Hij besloot daar echter een AIO voor vier jaar mee te financieren. Ik zou met mijn numeriek wiskundige achtergrond gaan werken aan het verbeteren van de numerieke technieken die gebruikt werden en eigenlijk moest er een, liefst analytische, inversie methode komen voor de dichtheidsfunctionaal.

Ik was net afgestudeerd in numerieke wiskunde en technische mechanica en had een jaar stage gelopen op het Nationaal Lucht- en Ruimtevaart Laboratorium in Amsterdam. Ik had ervaring met computational fluid dynamics en software engineering. Mijn laatste scheikunde kennis was er echter 8 jaar eerder in gegoten en ik wist niets van thermodynamica, statistische mechanica of überhaupt van fasescheidingsprocessen. Maar daar zijn boeken, artikelen, cursussen, studiegroepen (de SM-sessies met Aldert, Jos, Emile en Bernard) en veel discussies met geduldige collega's voor. Na een half jaar begon ik me een beetje thuis te voelen in de materie en was ik volop aan het stoeien met wavelets met het idee de hoeveelheid informatie in een simulatie te beperken en toch dezelfde resultaten te krijgen. Ook keek ik naar Padé-expansies, die mogelijk tot een directe inversiemethode konden leiden. Zo kwam ik uiteindelijk terecht bij Taylor-expansies voor de vrije energie (al heel lang bekend uit evenwichtsanalyses) die wel leidden tot mijn eerste artikel in JCP, maar helaas niet tot een inversie methode. En die is er tot nu toe ook niet gekomen. Ik raakte langzaam maar zeker betrokken bij het ontwikkelen van de methode en zijn toepasbaarheid zelf en in mindere mate bij het ontwikkelen van nieuwe numerieke technieken (veel succes op dit onzekere pad, Agur). De uitdaging om steeds nieuwe experimentele gegevens en processen met onze methode te kunnen representeren was en is enorm.

De afgelopen vier jaar waren voor mij niet alleen gekenmerkt door het doen van onderzoek. Terugkijkend heb ik vooral een enorme vrijheid genoten en veel contacten gelegd. Al in het begin liet Hans mij weten dat ik, als ik naar een congres, symposium of workshop zou willen, zelf aan de bel zou moeten trekken en dat heb ik volop gedaan. Natuurlijk waren er de nodige reizen in het kader van de EG-projecten, de reizen naar Burg Arras voor de jaarlijkse BIOMOS meeting met de groep van Wilfred van Gunsteren uit Zürich, de winterschools in Han-sur-Lesse en de SON-bijeenkomsten in Lunteren, maar daarnaast was er nog veel en

veel meer. In 1995 gaf ik presentaties op het Nederlands Mathematisch Congres (toevallig) in Groningen en op ICIAM95 (International Congress on Industrial and Applied Mathematics) met 5000 deelnemers (dat nooit meer) in Hamburg. Het jaar daarop (de zomer van 1996) vertrok ik voor een maand naar Santa Fe in New Mexico, voor de Complex Systems Summerschool van het Santa Fe Institute. Deze vier weken waren enorm stimulerend en hebben mij ervan overtuigd dat vernieuwend onderzoek een grote kans op bloei heeft in een multi-disciplinaire omgeving. De discussies tot in de laatste uurtjes, met economen, biologen, wiskundigen en natuurkundigen (Ljuba, Amalie, Michael, Salvatore en Vassily) waren vaak verhit, maar leidden meestal tot herkenning en begrip. Je kunt wel degelijk van elkaar leren! De grote hoeveelheid lezingen en studiegroepen, maar ook het Mexicaanse eten, de salsa, de Adobe-architectuur en het prachtige landschap rond Santa Fe, hebben bijgedragen tot een voor mij onvergetelijke maand. Ik heb ook nog kunnen rondkijken bij het Los Alamos National Laboratory (maar had geen 'clearance' voor de meest geheime gedeelten) en heb daar een voordracht gehouden in de groep van John Pearson. In het voorjaar van 1997 bezocht ik eerst Florida voor een Polymer Reaction Engineering Conference in het prachtige Palm Coast resort, waar ik kennis maakte met Rodney Fox en via hem met de groep van Prof. Chakrabarti. Tevens haalde Hans me over Splash en Space Mountain in Disneyland uit te proberen ... In mei gaf ik, dankzij sponsoring door Shell en NWO (dat ook eerder mijn reis naar Hamburg had gefinancierd) een voordracht op een congres van SIAM in Philadelphia over 'Mathematical Aspects of Materials Science'. Tot mijn verbazing bleken er veel wetenschappers te zijn waar ik artikelen van had gelezen. Ik had er een pittige discussie met Prof. Muthukumar en sprak met Prof. Cahn en medewerkers van Prof. Binder en Prof. Fredrickson. In juli verzorgden Hans en ik samen een workshop bij de Royal Academy of Chemistry in Londen over de theorie achter MesoDyn, waar we te gast waren bij Dominic Tildesley. Ook dichterbij huis heb ik voordrachten gegeven; op het minisymposium over 'Microstructure Formation in Polymer Systems' in Groningen, in Lunteren bij de SON-bijeenkomst, in Haren op het GBB-symposium en bij Unilever Vlaardingen in de groep van Jacob de Vlieg over 'Complex systems - ideas and applications'. Al deze reizen en presentaties hebben er voor mij vooral toe bijgedragen dat ik heb leren communiceren over wat ik doe op een, naar ik hoop duidelijke manier. Ik ben er, door het steeds opnieuw aan anderen uit te leggen, achter gekomen waarom ik eigenlijk doe wat ik doe en ik heb tientallen inspirerende wetenschappers (vaak ook op bezoek in Groningen) ontmoet. Een recente ontwikkeling is de oprichting (mede door mij) van InterScale in maart 1998. Met dit bedrijf hopen we advies te geven, contract onderzoek te verrichten en haalbaarheids studies te doen met betrekking tot MesoDyn. Daarbuiten richt InterScale zich op het ontwikkelen en bouwen van wetenschappelijke software voor de chemische industrie.

Buiten mijn onderzoek waren er de afgelopen vier jaar mijn activiteiten voor het vakgroepbestuur (wat met de invoering van de MUB

officieel niet meer bestaat, maar nog steeds functioneert), het regelen van de MD-group meetings en het (kort bestaande) MD-Group Quarterly. Buiten werktijd was er tijd voor klassiek ballet bij La Danse, bestuurswerkzaamheden bij de VVAO, squash, steps, model boetseren en schilderen (liefst in Frankrijk). Ik kan niet anders concluderen dan dat ik een fantastische vier jaar achter de rug heb. Mijn AIO-tijd stond voor vier jaar vrijheid; vrijheid om te onderzoeken wat mijn belangstelling had, vrijheid om te leren en cursussen te volgen waar dat nodig en/of interessant was en vrijheid om te experimenteren, ook wanneer dit niet altijd tot resultaten leidde.

Een heleboel mensen hebben ertoe bijgedragen dat ik op deze vier jaar op zo'n positieve manier terug kan kijken. Hans verschaftte de vrijheid en heel, heel erg veel ideeën, terwijl Herman Berendsen, Arthur Veldman en Eugen Botta op de achtergrond aanwezig waren voor advies waar dat nodig was. Bernard was eindeloos geduldig in het beantwoorden van al mijn vragen en altijd in voor een 'bordsessie'. Frans wist altijd wel een oplossing voor mijn Unix problemen en was een strenge doch rechtvaardige C++ leermeester. De samenwerking en wetenschappelijke discussies in de MesoDyn groep met Andrei, Agur, Bernard, Marten en Alexander hebben tot veel goede ideeën geleid en me over dode punten in mijn onderzoek heengeholpen. Emile heeft me vaak aangehoord en advies gegeven als het over thermodynamica ging en op Peter kon ik terugvallen voor LaTeX tips. Meerdere keren ben ik naar Polymeer Chemie gelopen om met Henk, Karin en Christiaan van gedachten te wisselen over fase-diagrammen. Margreet en Esther hebben talloze poststukken voor me verzonden, me wegwijs gemaakt in de financiële wereld van de RuG en reizen voor me geregeld. Kortom, zonder al deze mensen (en waarschijnlijk nog een aantal die ik hier vergeten ben) was ik niet binnen vier jaar aan het einde van mijn promotietijd gekomen.