

Streszczenie pracy doktorskiej pt
**Symulacja dynamiki molekularnej koalescencji
swobodnie zawieszone i siedzące kropelki**

Instytut Fizyki PAN

Przesłane przez

Soheil ARBABI

Koalescencja kropelek jest codziennym, naturalnym procesem, podczas którego kropelki deszczu łączą się podczas opadania, tworząc większe kropelki deszczu. Alternatywnie mogą zjednoczyć się na powierzchni liścia, tworząc malowniczą rosę w rześki wczesny jesienny poranek. Co więcej, zjawisko to znajduje liczne zastosowania. Na przykład w druku atramentowym uzyskanie wysokiej jakości wydruków zależy od precyzyjnej koalescencji kropelek farby na powierzchni papieru. W mikrofluidyce kapsułkowanie biocząstek w kropelkach staje się możliwe poprzez dodanie surfaktantów utrudniających koalescencję. W licznych badaniach próbowano wyjaśnić koalescencję zarówno metodami numerycznymi, jak i eksperymentalnymi. Jednakże metody te często charakteryzują się słabą rozdzielczością, szczególnie w początkowym stadium koalescencji, znanym jako „etap szczypnięcia”. Etap ten pozostaje niedostępny zarówno pod względem rozdzielczości przestrzennych i czasowych, w symulacjach metodą kontinuum i eksperymentalnych. To właśnie tu rolę może odegrać dynamika molekularna, która zapewnia odpowiednio wysoką rozdzielczość w czasie i przestrzeni, aby uchwycić początkową fazę szczypnięcia. Po szczypnięciu następuje utworzenie mostu pomiędzy dwiema kropelkami. Dynamika wzrostu tego pomostu odbywa się w ramach różnych reżimów; zaproponowano dotychczas różne sporne wyjaśnienia dotyczące tego zjawiska. Ponadto opisanie mechanizmu transportu masy cząsteczek surfaktantu podczas koalescencji stanowi kolejne wyzwanie. W symulacjach ciągłych możliwe jest zbadanie konwekcji i dyfuzji surfaktantów pod wpływem sił kapilarnych, wynikających głównie z zakrzywionej powierzchni styku między dwiema kropelkami. Dodatkowo w grę wchodzi efekty Marangoniego, generujące przepływy powierzchniowe w wyniku gradientów napięcia powierzchniowego w obecności surfaktantu. Matematyczny opis tych procesów obejmuje różne równania, każde oparte na określonych założeniach.

Jednakże niejasne pozostają szczegóły opisu transportu masy surfaktantów w skali molekularnej, szczególnie w odniesieniu do pomostu i początkowych etapów koalescencji. W przypadku koalescencji kropelek osiadłych wiadomo jeszcze znacznie mniej, pomimo znaczenia tego przypadku dla mikroprzepływów i technologii powlekania. Różne rodzaje podłoża, od niezwilżalnego do zwilżalnego, mogą wpływać na proces koalescencji i dynamikę wzrostu mostka.

Celem tej pracy jest kompleksowe wyjaśnienie koalescencji kropeł z wykorzystaniem metod dynamiki molekularnej. Badanie to obejmuje trzy różne typy surfaktantów i różne stężenia. Dodatkowo brane są pod uwagę kropelki polimerów o różnych długościach łańcucha. W niniejszej pracy zaobserwowano obecność dwóch odrębnych reżimów w dynamice wzrostu mostów: reżim termiczny i inercyjny. W szczególności wykazano, że przejście między tymi dwoma reżimami staje się bardziej wyraźne, gdy stężenie surfaktantu znacznie przekracza CAC (krytyczne stężenie agregacji). Ponadto drugim celem tej pracy jest kompleksowe wyjaśnienie mechanizmu transportu masowego. Tutaj porównany zostaje mechanizm transportu masy podczas koalescencji pod kątem stężeń surfaktantu zarówno poniżej, jak i powyżej CAC, obejmując trzy różne gatunki surfaktantu. Wyniki pokazują, że proces koalescencji rozpoczyna się od lokalnego wzrostu koncentracji surfaktantu, po czym następuje utworzenie warstwy pomiędzy dwiema kropelkami. W przypadkach, gdy stężenie przekracza CAC, film ten staje się ciągły, utrudniając tym samym udział wody w początkowych etapach koalescencji. Ponadto wielkoskalowe symulacje dynamiki molekularnej są wykorzystywane do badania koalescencji kropelek pokrytych surfaktantem, osadzonych na powierzchniach o różnej zwilżalności. Na uwagę zasługują podobieństwa które obserwuje się pomiędzy koalescencją kropelek osadzonych o równowagowych kątach zwilżania przekraczających 90° a swobodnie zawieszonymi kropelkami. Znacząca zmiana dynamiki mostu i mechanizmu transportu masy następuje poniżej kąta zwilżania 90° , gdy początkowy punkt styku przekształca się w małą, liniową strukturę, wywierającą wyraźny wpływ na różne aspekty procesu koalescencji. Taka konfiguracja pozwala wodzie aktywnie uczestniczyć w koalescencji od samego początku. W końcu zbadano koalescencję osadzonych kropelek polimeru o różnych długościach łańcucha, biorąc pod uwagę wpływ zwilżalności podłoża i lepkości kropeł na dynamikę koalescencji i wzrostu mostka. Z przeprowadzonych badań wynika, że obecność podłoża i jego zwilżalność mają istotny wpływ na dynamikę pomostu. Ogólnie rzecz biorąc, zwiększenie długości łańcucha polimeru powoduje zmniejszenie szybkości wzrostu pomostu i szybkości koalescencji.

Podsumowując, niniejsza praca oferuje kompleksowy opis koalescencji kropeł, co może odegrać ważną rolę w różnych zastosowaniach, w których szczegółowe zrozumienie zachowania koalescencji kropeł, zarówno swobodnie zawieszonych jak i znajdujących się na powierzchniach (siedzących), jest przedmiotem zainteresowania. Ponadto badania te mogą na różny sposób przyczynić się do rozwoju dziedziny. Mogą na przykład zaoferować nowe rozwiązania w przypadkach, gdzie dotychczasowe metody numeryczne lub eksperymentalne nie umożliwiają badania zjawisk na odpowiednio małej skali, czy to na poziomie mikro, nano, czy mniejszym.

16.Luty.2024

Soheil Arbab.