

Streszczenie

Formowanie kropeł czystych i zawierających surfaktanty z dyssypacyjną dynamiką cząstek wielu ciał

Luís Henrique Carnevale da Cunha

W niniejszej rozprawie wykorzystano dynamikę cząstek dyssypatywnych wielu ciał (MDPD) do zbadania mechanizmów molekularnych leżących u podstaw rozpadu czystych i obciążonych surfaktantami nici cieczy. MDPD jest opartą na cząstkach techniką symulacji mezoskalowej, która wychwytuje fluktuacje termiczne i interakcje miękkiego rdzenia, łącząc skalę molekularną i makroskopową. Symulując niestabilność Rayleigha–Plateau, MDPD zapewnia krytyczny wgląd w to, jak siły molekularne i fluktuacje termiczne wpływają na tworzenie się kropli w nanoskali.

Środki powierzchniowo czynne, które adsorbują się na granicy faz cieczy i zmniejszają napięcie powierzchniowe, odgrywają kluczową rolę w zmianie dynamiki rozpadu ciekłych nici. Ich obecność wprowadza dodatkową złożoność poprzez napędzanie przepływów Marangoniego z powodu gradientów napięcia powierzchniowego. Symulacje MDPD pokazują, w jaki sposób stężenie środka powierzchniowo czynnego wpływa na wielkość kropli, rozkład i tworzenie niepożądanych kropeł satelitarnych, oferując strategię łagodzenia tych efektów.

Niniejsze badanie koncentruje się na wzajemnym oddziaływaniu między interakcjami molekularnymi a niestabilnością płynu podczas rozpadu ciekłej nici, podkreślając, w jaki sposób mechanizmy na poziomie molekularnym przyczyniają się do różnych reżimów rozpadu. Odkrycia te przyczyniają się do lepszego zrozumienia niestabilności Rayleigha–Plateau i zapewniają praktyczny wgląd w optymalizację tworzenia kropli w zastosowaniach wymagających precyzyjnej kontroli nad zachowaniem płynu.

Integrując wiedzę na poziomie molekularnym z symulacjami mezoskalowymi, badania te oferują ramy do badania tworzenia się kropeł i niestabilności płynów. Wyniki mają znaczący wpływ na technologie takie jak produkcja nanotechnologiczna, mikroprzepływy i emulgowanie, torując drogę do bardziej wydajnych i kontrolowanych systemów opartych na kroplach.