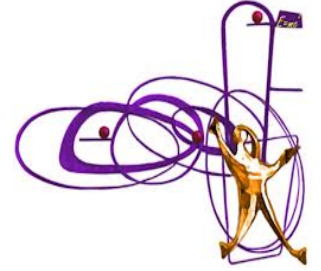




UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI BARI ALDO MORO

DIPARTIMENTO INTERATENEO DI FISICA MICHELANGELO MERLIN

CORSO DI DOTTORATO XXX CICLO



Proprietà dinamiche di gocce ed emulsioni in fluidi strutturati e attivi

Tutori: Professor Giuseppe Gonnella-Dottor Antonio Lamura

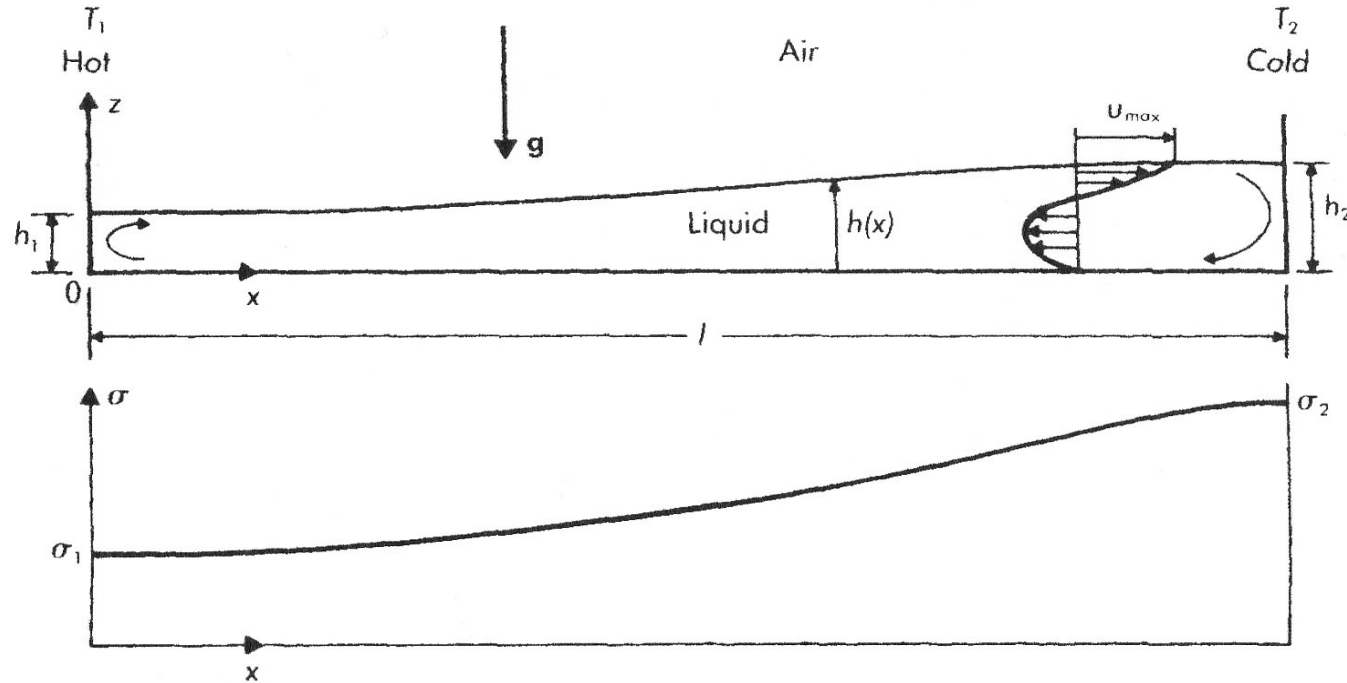
Dottorando: Federico Fadda

Linee generali del progetto di ricerca

- 1) Studio del moto autopropulso di gocce per *effetto Marangoni* mediante metodo *Lattice Boltzmann (LBM)*.
 - Trasduzione di energia chimica in meccanica
 - Modellazione di sistemi biologici
- 2) Studio di gocce di cristalli liquidi in fase isotropa.
 - Frustrazione geometrica -> transizioni
- 3) Emulsioni a più gocce di cristallo liquido
 - Modelli per gocce stabili con surfattante
- 4) Proprietà reologiche dei cristalli liquidi

Sviluppo di una metodologia per la simulazione di tali sistemi -> metodo LBM.

L'effetto Marangoni



Velocità del fluido in funzione del gradiente di tensione superficiale:

$$u = \frac{z}{2\eta} \left(\frac{3z}{2h} - 1 \right) \frac{d\sigma}{dx}$$

Modello idrodinamico per una miscela binaria in presenza di surfattante

- Funzionale di energia libera:

$$\mathfrak{F}(\phi, c) = \int \left[\frac{B(c)}{2} (\nabla\phi)^2 + f_{GL}(\phi) + f_0(c) \right] d\mathbf{r}$$

con $B(c) = B_0 + B_1 c$, $B(c) > 0$, $f_{GL}(\phi) = \frac{a}{2} \phi^2 + \frac{b}{4} \phi^4$, $f_0(c) = c \ln c$.

- Potenziali chimici del sistema dei due fluidi e del surfattante:

$$\mu = \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial \phi} = a\phi + b\phi^3 - B(c)\nabla^2\phi - B_1 \nabla c \cdot \nabla \phi$$

$$\mu' = \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial c} = \ln c + 1 + \frac{B_1}{2} (\nabla\phi)^2$$

- Tensore di pressione:

$$P_{\alpha\beta} = \left[\frac{a}{2} \phi^2 + \frac{3b}{4} \phi^4 - B(c)\phi \nabla^2\phi + c - B_1 \phi \nabla c \cdot \nabla \phi - \frac{B_0}{2} (\nabla\phi)^2 \right] \delta_{\alpha\beta}$$

Descrizione dinamica del sistema studiato

$n(\mathbf{r}, t)$ campo di densità totale, $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ campo di velocità

$\phi(\mathbf{r}, t)$, $c(\mathbf{r}, t)$ campi di concentrazione rispettivamente della differenza delle concentrazioni dei due fluidi (parametro d'ordine) e del surfattante

$P_{\alpha\beta}$ tensore di pressione, η e ζ viscosità di shear e bulk, D coefficiente di diffusione del surfattante

Equazione di continuità : $\partial_t n + \partial_\alpha (n u_\alpha) = 0$

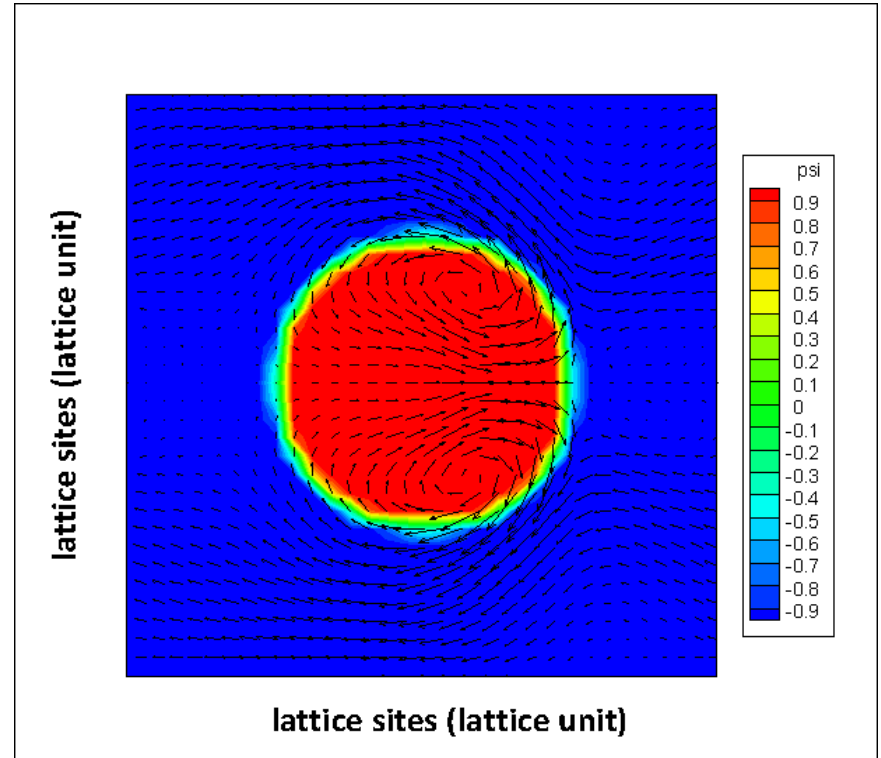
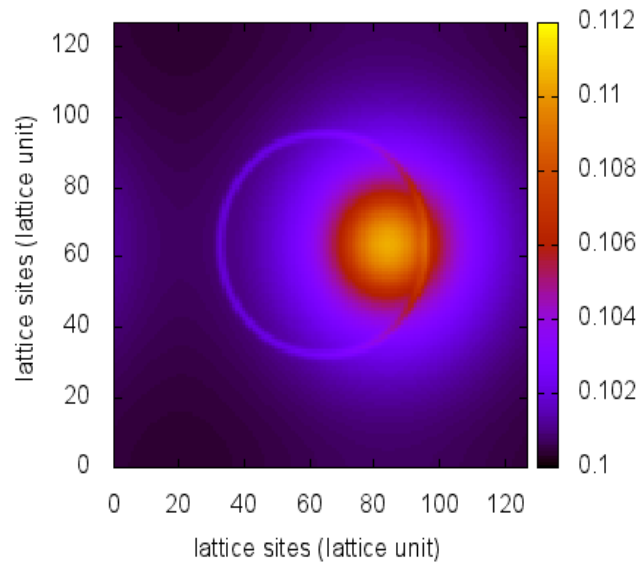
Equazione di Navier-Stokes:

$$\partial_t (n u_\beta) + \partial_\alpha (n u_\alpha u_\beta) = -\partial_\alpha P_{\alpha\beta} + \partial_\alpha [\eta (\partial_\alpha u_\beta + \partial_\beta u_\alpha - \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma) + \zeta \delta_{\alpha\beta} \partial_\gamma u_\gamma]$$

Equazioni di convezione-diffusione: $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \nabla^2 \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial \phi}$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} c) = \nabla \cdot \left[D c \nabla \frac{\partial \mathfrak{F}}{\partial c} \right]$$

Contour plot delle due concentrazioni



Modello LBM ibrido con termine di forza

$$f_i(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i \Delta t_{LB}, t + \Delta t_{LB}) - f_i(\mathbf{r}, t) = -\frac{\Delta t_{LB}}{\tau} [f_i(\mathbf{r}, t) - f_{i,eq}(\mathbf{r}, t)] + \Delta t_{LB} F_i$$

$n = \sum_i f_i$ $n\mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i + \frac{1}{2} \mathbf{F} \Delta t_{LB}$ con \mathbf{F} densità di forza di interazione delle componenti della miscela.

Modello LBM ibrido ->

- Nel limite continuo il metodo LBM ricostruisce l'equazione di continuità e di Navier-Stokes.
- Le equazioni di convezione-diffusione delle due concentrazioni sono risolte con uno schema alle differenze finite.

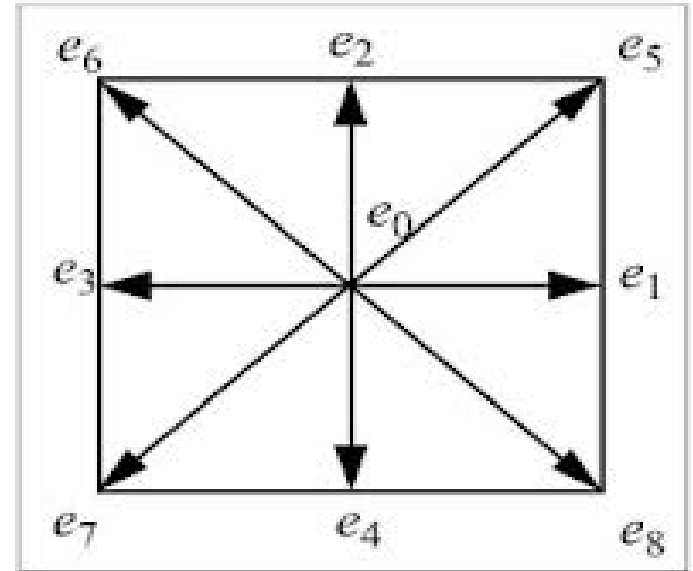
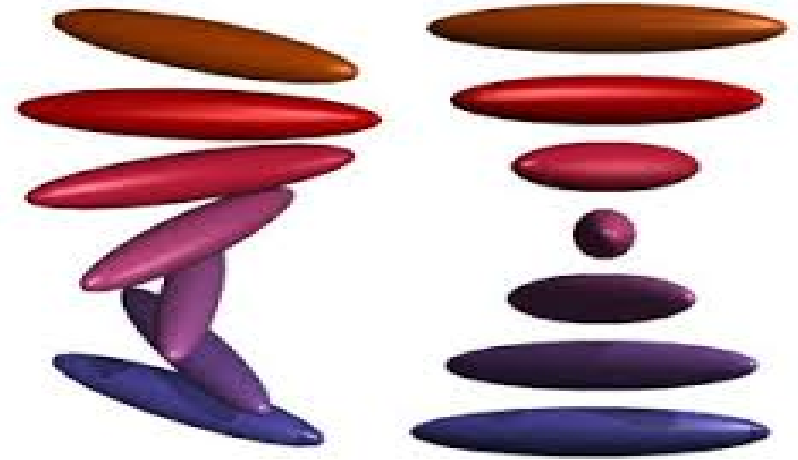
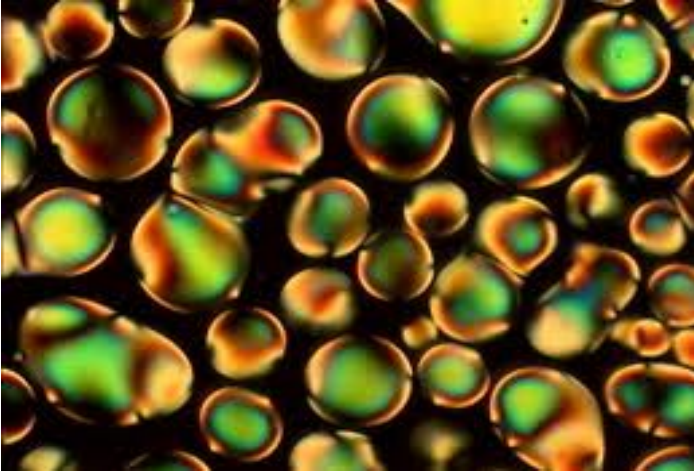


Figure 1. D2Q9 model

Studio dei cristalli liquidi



- 1) Nel passaggio da miscele multifase ai cristalli liquidi le equazioni dinamiche si complicano.
- 2) Parametro d'ordine delle miscele $\phi(\mathbf{x},t)$ campo scalare \rightarrow tensore d'ordine \mathbf{Q} per i cristalli liquidi.
- 3) Applicazioni tecnologiche \rightarrow progettazione display dei dispositivi elettronici e dispositivi fotonici.