

DIPARTIMENTO INTERATENEO DI FISICA "MICHELANGELO MERLIN"

DOTTORATO DI RICERCA IN FISICA XXX CICLO

DOTTORANDO:

FEDERICO FADDA

TITOLO PROGRAMMA DI RICERCA

PROPRIETÀ DINAMICHE DI GOCCE ED EMULSIONI IN FLUIDI STRUTTURATI E
ATTIVI

PROPOSTA TUTORE/I

GIUSEPPE GONNELLA, ANTONIO LAMURA

INTRODUZIONE / OBIETTIVI DEL PROGRAMMA

LO STUDIO DELLA DINAMICA DELLE GOCCE E DELLE EMULSIONI È UN CAMPO DI RICERCA IN RAPIDA ESPANSIONE

CON IMPORTANTI RAMIFICAZIONI NELLE SCIENZE APPLICATE. AD ESEMPIO, L'INCAPSULAZIONE ED IL TRASPORTO CONTROLLATO DI DETERMINE SOSTANZE MEDIANTE GOCCE DI LIQUIDO PUÒ ESSERE LA BASE DELLO SVILUPPO DI TECNOLOGIE DI ENORME IMPORTANZA NELLE APPLICAZIONI MEDICHE E FARMACOLOGICHE.

LA PREPARAZIONE DI UNA EMULSIONE STABILE DI GOCCE RICHIEDE LA PRESENZA DI UNA SOSTANZA TENSIOATTIVA

IN GRADO DI IMPEDIRE LA COALESCENZA TRA LE GOCCE E DI REGOLARNE LA TAGLIA. D'ALTRO CANTO, PROPRIO UNA IMMISSIONE CONTROLLATA DI SURFATTANTE IN UNA MISCELA BINARIA PUÒ CONSENTIRE IL MOTO AUTOPROPULSO DI UNA GOCCIA PER EFFETTO MARANGONI ("SELF-PROPELLED MOTION OF A FLUID DROPLET UNDER CHEMICAL REACTION" S.YABUNAKA, T.OTHA AND N.YOSHINAGA). QUESTO È UN IMPORTANTE ESEMPIO DI FLUIDO ATTIVO, DOVE UNA CERTA QUANTITÀ DI ENERGIA CHIMICA IMMAGAZZINATA NEL SISTEMA VIENE SPESA PER COMPIERE LAVORO O AI FINI DELLA GENERAZIONE DI TRASPORTO O MOTO. LO STUDIO DEI FLUIDI ATTIVI COSTITUISCE UN CAMPO DI RICERCA DI RECENTE SVILUPPO, IMPORTANTE SIA DAL PUNTO DI VISTA APPLICATIVO CHE DA UN PUNTO DI VISTA PIÙ TEORICO PER IL NATURALE CARATTERE DI NON EQUILIBRIO DI QUESTI SISTEMI.

EMULSIONI CON PROPRIETÀ OTTICHE MOLTO PARTICOLARI SONO OTTENIBILI CON GOCCE DI CRISTALLO LIQUIDO IN UN FLUIDO ISOTROPO. IL RUOLO DEL SURFATTANTE IN QUESTO CASO È DUPLICE. ESSO NON SOLO REGOLA LA DIMENSIONE DELLE GOCCE MA INTERVIENE ANCHE SULLE CONDIZIONI DI

ANCORAGGIO DELLE MOLECOLE DI CRISTALLO LIQUIDO SULL'INTERFACCIA CON IL SOLVENTE. L'EFFETTO RISULTANTE È LA PRESENZA DI UN ULTERIORE CONTRIBUTO DI ENERGIA ELASTICA CHE DERIVA DAI DIFETTI TOPOLOGICI NEL CRISTALLO LIQUIDO NEMATICO O COLESTERICO CONFINATO (*"INVERTED AND MULTIPLE NEMATIC EMULSIONS"*, P.POULIN AND D.A.WEITZ). QUESTA ENERGIA CREA UN'ULTERIORE BARRIERA ALLA COALESCENZA TRA LE GOCCE E COSTITUISCE UNA SORTA DI CONTRIBUTO TOPOLOGICO ALLA STABILITÀ DELLE EMULSIONI.

UNA DESCRIZIONE DINAMICA COMPLETA DEI SISTEMI A CUI SI È FATTO CENNO, NON ESISTENTE FINORA IN LETTERATURA, SI BASA SULLE EQUAZIONI DI NAVIER-STOKES ACCOPPIATE AD EQUAZIONI DI REAZIONE-DIFFUSIONE PER LE ALTRE COMPONENTI DEL SISTEMA. OBIETTIVO DEL PROGRAMMA DI DOTTORATO È SVILUPPARE DELLE METODOLOGIE DI STUDIO NUMERICO PER QUESTI SISTEMI APPROFONDENDO L'ANALISI SPECIFICA DELLA DINAMICA DI ALCUNI DI ESSI. PER LO SVILUPPO DI QUESTE METODOLOGIE VERRANNO CONSIDERATI ALGORITMI DI CALCOLO DEL TIPO "LATTICE BOLTZMANN METHODS – LBM", CHE SONO STATI GIÀ UTILIZZATI PER LO STUDIO DELLA DINAMICA DI FLUIDI COMPLESSI E DEI CRISTALLI LIQUIDI (*"SWITCHING DYNAMICS IN CHOLESTERIC BLUE PHASES"*, A.TIRIBOCCHI, G. GONNELLA, D.MARENDUZZO AND E.ORLANDINI, *"USING LATTICE BOLTZMANN ALGORITHM TO EXPLORE PHASE ORDERING IN FLUIDS"*, G.GONNELLA AND J.M.YEOMANS). TRA I SISTEMI CHE VORREMO STUDIARE VI SONO EMULSIONI DI CRISTALLI LIQUIDI NEMATICI E COLESTERICI ANCHE IN PRESENZA DI FLUSSO DI "SHEAR". PIÙ DETTAGLI VERRANNO DATI NELLE SEZIONI SUCCESSIVE.

ATTIVITÀ I ANNO

L'ATTIVITÀ DEL PRIMO ANNO SARÀ IL NATURALE PROSEGUIMENTO DEL PROGRAMMA DI RICERCA INTRAPRESO CON LA TESI MAGISTRALE. OBIETTIVO DI QUESTA RICERCA È L'ANALISI DELLA DINAMICA DI UNA GOCCIA IN UN SISTEMA BINARIO IN PRESENZA DI UNA TERZA COMPONENTE DI SURFATTANTE. LA POSSIBILITÀ DI OTTENERE TENSIONI SUPERFICIALI ANISOTROPE, PER EFFETTO MARANGONI, PUÒ DAR LUOGO AD UN MOTO AUTOPROPULSO DELLA GOCCIA.

PER QUESTO FENOMENO ESISTE UN'ANALISI TEORICA, CHE SI BASA SU VARIE APPROSSIMAZIONI, E CHE BENEFICEREBBE MOLTISSIMO DI UNO STUDIO NUMERICO DEL PROBLEMA. QUESTO STUDIO VERRÀ AFFRONTATO ANALIZZANDO CON TECNICHE LBM LE EQUAZIONI DI NAVIER-STOKES E LE EQUAZIONI DI CONVEZIONE-DIFFUSIONE PER I DUE CAMPI SCALARI RAPPRESENTANTI IL PARAMETRO D'ORDINE DELLA MISCELA E LA DENSITÀ DI

SURFATTANTE.

UNA PARTE DELLE ATTIVITÀ DEL PRIMO ANNO SARÀ POI DEDICATA ALLO STUDIO DELLE EQUAZIONI DELLA DINAMICA DEI CRISTALLI LIQUIDI (*"THERMODYNAMICS OF FLOWING SYSTEMS WITH INTERNAL MICROSTRUCTURE"*, ANTONY N.BERIS, BRIAN J.EDWARDS). QUESTE SI DIFFERENZIANO DA QUELLE PER LE MISCELE BINARIE IN QUANTO DEVONO TENERE CONTO DELLA NATURA TENSORIALE DEL PARAMETRO D'ORDINE DEI CRISTALLI LIQUIDI.

QUESTE EQUAZIONI VERRANNO QUINDI IMPLEMENTATE IN UN CODICE PER IL CALCOLO NUMERICO DI TIPO LBM TENENDO CONTO DELLA NECESSITÀ DI DOVER EFFETTUARE STUDI TRIDIMENSIONALI CHE RICHIEDERANNO L'USO DI RISORSE DI CALCOLO IN PARALLELO. VERRANNO CONSIDERATE DIFFERENTI CONDIZIONI AL CONTORNO PER IL CAMPO DI VELOCITÀ E DIVERSI ANCORAGGI ALLE PARETI ESTERNE PER IL CRISTALLO LIQUIDO. QUESTO CONSENTIRÀ DI AVERE A DISPOSIZIONE UN METODO DI STUDIO ESTREMAMENTE VERSATILE CON AMPIE POSSIBILITÀ DI ANALISI DI DIFFERENTI SITUAZIONI DI INTERESSE SPERIMENTALE.

VORREMO ANCHE STUDIARE UN DIFFERENTE PROBLEMA LEGATO ALLA CRESCITA DI BOLLE DI VAPORE E ALLA PRESENZA DI CAVITAZIONE IN CONDIZIONI DI INSTABILITÀ PER UN FLUIDO MULTIFASE. L'OBIETTIVO È ANALIZZARE LE LEGGI DI CRESCITA DELLA SINGOLA BOLLA ANCHE IN PRESENZA DI "SHEAR" CONFRONTANDO I RISULTATI CON QUELLI PREVISTI DALL'EQUAZIONE DI RAYLEIGH-PLESSET IN CONDIZIONI ISOTROPE. PER UN FLUIDO TRIDIMENSIONALE SI VORRÀ VALUTARE LA SOGLIA SPINODALE IN PRESENZA DI "SHEAR".

I RISULTATI DI QUESTA RICERCA POSSONO ESSERE DI ESTREMO INTERESSE PER LA COMPrensione DELL'ORIGINE FISICA DELLA SOGLIA DI CAVITAZIONE INDOTTA DINAMICAMENTE IN SITUAZIONI DI FLUSSO CON RESTRIZIONI GEOMETRICHE. QUESTO STUDIO RICHIEDE LO SVILUPPO DI CODICI TRIDIMENSIONALI LBM PER MISCELE LIQUIDO-VAPORE E PUÒ COSTITUIRE UN REALE PROGRESSO RISPETTO ALLE PIÙ TRADIZIONALI DESCRIZIONI OGGIGIORNO ESISTENTI NELLA FLUIDODINAMICA COMPUTAZIONALE CHE FANNO TUTTE USO DI MODELLI "AD HOC" PER LA CAVITAZIONE.

ATTIVITÀ DI RICERCA II E III ANNO

IL PROGRAMMA DI RICERCA PROSEGUIRÀ SVILUPPANDO LE DIREZIONI INTRAPRESE NEL PRIMO ANNO.

LO STUDIO DELLE GOCCE AUTOPROPULSE SARÀ ESTENDIBILE ALLA PRESENZA CONTEMPORANEA DI PIÙ GOCCE.

NEI SISTEMI PARTICELLARI DI MATERIA ATTIVA, GENERALIZZAZIONE AL CASO ATTIVO DEL MOTO

BROWNIANO E RILEVANTI PER LA DESCRIZIONE DI VARI SISTEMI BIOLOGICI, ANCHE IN ASSENZA DI INTERAZIONE ATTRATTIVA SI OSSERVA UNA TRANSIZIONE DI FASE CON FORMAZIONE DI CLUSTER DI PARTICELLE ATTIVE.

VORREMO ALLORA ANALIZZARE LA POSSIBILITÀ CHE UNA TRANSIZIONE DI FASE DI TALE GENERE CON LA COALESCENZA O LA FORMAZIONE DI CLUSTER SI REALIZZI ANCHE PER LE GOCCE AUTOPROPULSE.

LE METODOLOGIE LBM SVILUPPATE NEL PRIMO ANNO VERRANNO APPLICATE ALLO STUDIO DELLE EMULSIONI DI CRISTALLO LIQUIDO IN FLUIDO ISOTROPO, ANCHE IN PRESENZA DI SURFATTANTE.

IN UNA PRIMA PARTE DI QUESTO STUDIO VERRÀ CONSIDERATA UNA SINGOLA GOCCIA DI CRISTALLO LIQUIDO COLESTERICO E VERRÀ ESAMINATO L'EFFETTO DELLA TAGLIA FINITA DELLA GOCCIA SULL'ORDINE COLESTERICO E SULLA POSSIBILE INDUZIONE DI UNA TRANSIZIONE COLESTERICO-NEMATICA ALL'INTERNO DELLA GOCCIA.

UN'ANALOGA TRANSIZIONE PUÒ ESSERE ANCHE STUDIATA NEL "BULK" DEL SISTEMA VARIANDO LE DIMENSIONI DELLA CELLA DI FLUIDO O CONSIDERANDO GLI EFFETTI DI UN CAMPO ELETTRICO ESTERNO. IL SISTEMA SARÀ CARATTERIZZATO DALLA PRESENZA DI "TEXTURES" NOTE COME "CHOLESTERIC FINGERS" E CI PROPONIAMO DI STUDIARE LA DINAMICA DI QUESTE "TEXTURES" (*"STATIC AND DYNAMIC PROPERTIES OF CHOLESTERIC FINGERS IN ELECTRIC FIELD"*, P.OSWALD, J.BAUDRY, S.PIRKL).

LA PRESENZA DI SURFATTANTE È NECESSARIA PER EMULSIONI CON PIÙ GOCCE. ANCHE IN QUESTO CASO VERRANNO VALUTATI GLI EFFETTI DELLA FRUSTRAZIONE GEOMETRICA SULL'ORDINE COLESTERICO E SU UNA POSSIBILE TRANSIZIONE COLESTERICO-NEMATICA. ANCHE PER UNA SINGOLA GOCCIA DI NEMATICO PUÒ ESSERE VALUTATO

L'EFFETTO DELLA PRESENZA DEL SURFATTANTE SULL'EVOLUZIONE MORFOLOGICA DELLA GOCCIA DOVUTA AL COMBINATO EFFETTO SULLA TENSIONE SUPERFICIALE E SULLE PROPRIETÀ DI ANCORAGGIO.

E' INFINE IMPORTANTE DAL PUNTO DI VISTA APPLICATIVO L'ANALISI DELLA RISPOSTA VISCOSA DELLE EMULSIONI AD UN FLUSSO DI "SHEAR". QUESTA POTRÀ ESSERE VALUTATA IN FUNZIONE DELLA TAGLIA DELLE GOCCE DISPERSE NEL SISTEMA E DELLA CONCENTRAZIONE DI SURFATTANTE. ANALOGAMENTE, IN CASO DI PRESENZA DEI "CHOLESTERIC FINGERS" SI POTRÀ STUDIARE IL PROFILO STAZIONARIO DI VELOCITÀ ED ESAMINARE L'EVENTUALE POSSIBILE PRESENZA DI UN FLUSSO A BANDE.

TITOLO TESI DI LAUREA MAGISTRALE

SVILUPPO DI UN NUOVO MODELLO LBM IBRIDO PER UNA MISCELA BINARIA IN PRESENZA DI SURFATTANTE

ELENCO ESAMI SOSTENUTI:

NOME ESAME	DATA	VOTO	CFU (OVE PREVISTO)
MECCANICA STATISTICA	21/12/2012	29	6
METODI MATEMATICI DELLA FISICA	15/02/2013	26	6
STRUTTURA DELLA MATERIA	12/03/2013	30	6
MECCANICA STATISTICA AVANZATA	30/05/2013	29	6
MECCANICA QUANTISTICA AVANZATA	17/06/2013	30	6
FISICA TEORICA	31/07/2013	30	12
METODI PROBABILISTICI DELLA FISICA	18/09/2013	28	6
LABORATORIO DI FISICA COMPUTAZIONALE	20/09/2013	30	6
TEORIE CINETICHE DEL TRASPORTO	09/10/2013	30 E LODE	6
RELATIVITA' GENERALE	19/12/2013	30	6
MODELLO STANDARD	22/01/2014	30 E	6



		LODE	
COSMOLOGIA	12/02/2014	30	4
APPLICAZIONI FISICHE DELLA TEORIA DEI GRUPPI	28/02/2014	30 E LODE	4
TIROCINIO	30/08/2014	IDONEO	8
PROVA FINALE	18/09/2014	IDONEO	32

BARI, _____

FIRMA
