

Czy pamiętasz swój zachwyt, gdy jako dziecko patrzyłeś co się dzieje z kroplami deszczu na szybie albo z kroplami wody kapiącymi z kranu? Zachowania kropli wciąż są, mimo swej powszechności, fascynujące z naukowego punktu widzenia. Dogłębne poznanie zjawisk, które decydują co stanie z kroplą, która zderzy się z inną kroplą lub z powierzchnią o określonych właściwościach (np. gładką lub porowatą) stanowi cel badań wielu gałęzi nauki od przemysłu naftowego (np. rozpylanie paliwa) i inżynierię materiałową (np. chłodzenie urządzeń elektronicznych o wysokiej mocy) po medycynę (np. transport leków). Pozwoli ono nie tylko na przewidzenie zachowania kropli w określonych warunkach, ale na takie zaprojektowanie tych warunków bądź samej kropli, aby zachowywała się ona w pożądanym sposób. Jednym z pomysłów na przejęcie kontroli nad ruchem kropli jest dodanie do niej związków powierzchniowo czynnych, tzw. surfaktantów. Są to dwuczłonowe cząsteczki, których jedna część dobrze rozpuszcza się w wodzie, druga zaś słabo bądź wcale. Dzięki takiej budowie, cząsteczki surfaktantów chętnie występują na granicy faz ciekłej i gazowej a więc na powierzchni kropli. Biorą one wtedy czynny udział w procesach przekształcania się kropli podczas ich łączenia się i rozpadu. Procesy te są niezwykle złożone i zachodzą w różnych skalach czasowych. Składają się na nie zarówno mikroskalowe ruchy cząsteczek rozpuszczalnika i surfaktantów jak i obserwowane gołym okiem zmiany kształtu całych kropli. Aby zaprojektować optymalne warunki dla przekształcania się kropli, niezbędne jest zastosowanie metodologii pozwalającej na równoczesne obserwowanie wszystkich wymiarów jej dynamiki i analizę ich wzajemnej korelacji. Idealne rozwiązanie dla tego typu badań, gdzie równolegle można obserwować kilka wymiarów badanych zjawisk, stanowią nowoczesne wieloskalowe metody komputerowego modelowania w odniesieniu do badań doświadczalnych. W niniejszym projekcie zaawansowane symulacje komputerowe zostaną użyte do obserwacji i analizy ruchu cząsteczek surfaktantów wewnątrz kropli podczas procesów przekształcania się kropli w przypadku ich łączenia się i rozpadu. Na podstawie tych analiz wyznaczone zostaną, kluczowe dla zastosowań przemysłowych, dynamiczne właściwości kropli zależnie od rodzaju cząsteczek surfaktantów ich wypełniających.