

Celem projektu jest przebadanie wymiany ciepła oraz masy w komorze o rozmiarach mikrometrycznych zawierającą docelowo bakterie lub wirusy, które miałyby zostać poddane procesowi fototermoablacji przy użyciu gęsto rozmieszczonych nanocząstek złota o kształcie nanoprętów. Głównym zadaniem ma być dokonanie optymalizacji kształtu nanocząstek oraz samej komory w celu maksymalizacji temperatury i dezaktywacji jak największej ilości bakterii czy wirusów. Dezaktywacja bakterii i wirusów następuje po uzyskaniu pewnej granicznej temperatury w obszarze komory i dlatego tak ważna jest łączność dwóch metod eksperymentalnej i numerycznej, aby potwierdzić zakres nagrzania materiału.

Praca zakłada zaprojektowanie eksperymentów opartych na pomiarze rozkładu temperatury na wybranej powierzchni przy pomocy skalibrowanej do wysokich temperatur kamery termowizyjnej oraz wartości prędkości wlotowych i wylotowych płynów z bakteriami do komory przy pomocy manometrów lub kamer o odpowiednim powiększeniu i rozdzielczości. Układ ma zostać zrealizowany poprzez naniesienie na szkło laboratoryjne stabilizowanych nanoprętów złota, regulacje rozmieszczeniem rurek wlotowych i wylotowych oraz materiału izolacyjnego, które w rezultacie pozostawią miejsce i umożliwią dopływ do stworzonej w ten sposób komory bakterioobójczej.

Nowe eksperymenty są rozwinięciem tych wstępnie przeprowadzonych przy współpracy z Uniwersytetem Sapienza w Rzymie i miałyby zostać przeprowadzone dla różnych rozmiarów nanoprętów złota, posiadające inne maksymalne przekroje czynne w reżimie długości fali, dla różnych rozmiarów komory oraz dla różnych płynów (powietrze, woda, glicerol, itp.). Również, z uwagi na teorię oddziaływań między światłem a cząstkami, którymi tutaj głównie miałyby być teorie Rayleigha-Drudego oraz Mie-Lorenza, warto przebadać koncentracje nanocząstek na naniesionej powierzchni.

Przy analizie numerycznej wykonawcy projektu są obcy w swej sposobności i mają zamiar użyć kilku dobrze poznanych teorii do opisu oddziaływań typu płyn-ciało stałe (skok temperatury Smoluchowskiego, efekt Marangoniego, termiczna transpiracja Reynoldsa, skok fazy w przypadku odparowania cieczy), modeli wielofazowych (bazujących na metodach DPM) oraz radiacyjnej wymiany ciepła dla cząstek (modele *discrete ordinates methods* (DOM) oraz *dependence-included discrete ordinates methods* (DIDOM)).

Niemniej, w celu wyeliminowania efektów synergicznych, dotyczących głównie realnego rozkładu wielkości nanoprętów, badacze wprowadzą do obliczeń pewne warunki, które jednak wymagają czasu i porównania ich użyteczności na podstawie wcześniejszymi wynikami, niezawierających tego typu efektów.

Docelowymi wynikami tej pracy mają być:

- ustalenie warunków, dla których skok temperatury w wyniku fototermoablacji jest największy;
- przestudiowanie wymiany ciepła w nanoskali i jej implementacja w przypadku nanoprętów-płyn;
- analiza ruchów konwekcyjnych w mikro- i nanoskali;
- teoretyczne przedstawienie sposobu symulacji właściwości cieplnych bakterii wraz z ich implementacją w wybranym środowisku obliczeniowym.