

Simulazioni al computer della formazione di nanogocce

Roberto Berardi, Alberto Costantini, Luca Muccioli,
Silvia Orlandi, and Claudio Zannoni

Dipartimento di Chimica Fisica e Inorganica
Università degli Studi di Bologna

Presentiamo i primi risultati di una serie di esperimenti al computer, effettuati mediante simulazioni Molecular Dynamics, sulla formazione di goccioline nanometriche a partire da una soluzione binaria uniforme ed isotropa. Lo scopo di questi esperimenti è quello di studiare l'effetto della temperatura, dell'affinità soluto-solvente, e delle dimensioni del campione sulla dinamica della segregazione e sulla struttura delle nanogocce. Il sistema modello che abbiamo studiato è una miscela di particelle Lennard-Jones (solvente) e Gay-Berne (soluto) che sono state parametrizzate in modo da dare per i sistemi a singolo componente, e nell'intervallo di temperature studiate, il solvente in fase liquida ed il soluto in fase isotropa, nematica, e smectica.