



КАТЕДРА МЕТЕОРОЛОГИЯ И ГЕОФИЗИКА
ФИЗИЧЕСКИ ФАКУЛТЕТ - СУ "Св. Кл. Охридски"

Семинар „Кръстанов“

В четвъртък, 01.06.2023, 17:15 ч., офлайн

Димитър Пецев

от Департамента по Инженерна Химия и Биология и Центъра по
Материали на Университета в Ню Мексико, Албукърки

ще изнесе доклад на тема:

**Структурни ефекти върху взаимодействията между течности и твърди
повърхности**

Резюме: Взаимодействията между течности и твърди повърхности обхващат широк кръг от явления в природата и практиката. Фокусът на нашето изложение разглежда примери като Двоен Електричен Слой (ДЕС), който се образува при контакт на електролит с друг тип фаза, капилярен транспорт в порести материали, и дифузия в полимерни слоеве.

Анализът на заредени междуфазови граници, включващи електролити, показва, че локалната структура на разтвора и термодинамичното равновесие, определящо повърхностния заряд, са взаимосвързани и играят значителна роля за свойствата на тези системи. Структурата на течността, от друга страна, се определя до голяма степен от неутралния разтворител. Следователно отчитането на приноса на молекулярните свойства, дължащи се на разтворителя, е необходимо за количественото описание на ДЕС. Използваният от нас метод се основава на теорията на функционална на плътността (Density Functional Theory, DFT) която предлага бърза и икономична алтернатива на Молекулната Динамика или Монте Карло симулации на подобни системи.

Капилярният транспорт в порести среди е обект на анализ от почти 100 години, започвайки с модела на Лукас и Уошбърн. Нашият интерес е основно върху материали, които променят своите размер и форма. Тези промени водят до различни функционални зависимости на скоростта на флуиден транспорт от времето.

Молекулярната дифузия в полимерни слоеве е анализирана използвайки DFT подхода споменат по-горе. Анализът позволява да са моделира и предсказва какъв е ефектът на потенциала на средната сила, който е резултат от полимерната структура, върху молекулярния транспорт.

Любезно сте поканени да присъствате!