ABSTRACT

BOTTOM-UP AND DIRECTED SELF-ASSEMBLY USING THE LATTICE BOLTZMANN METHOD

Lattice Boltzmann method (LBM) is emerging as a powerful technique in computational fluid dynamics (CFD) with applications in automotive, aerospace, energy and geoscience sectors. Based on the kinetic theory, LBM allows for better inclusion of mesoscopic physics than conventional CFD approaches. As a result, LBM has the potential to handle challenges in the field of nano and micro scale self-assembly. In this thesis, LBM is employed in two regimes: bottom-up and directed self-assembly. The scope and viability of LBM are evaluated for these applications.

Firstly, the self-assembly of 3D amphiphilic Janus particles (JP) in both the bulk and confined arrangements is set up with the inclusion of thermal fluctuations. A novel particle periodic boundary condition is proposed along with the incorporation of an anisotropic particle pair potential from molecular dynamics (MD). Preliminary JP self-assembly results of cluster size distribution, shapes, number density and orientation profiles agree with the corresponding MD studies in the literature. The same serves to extend LBM for soft matter and highlights its significance and limitations. Next, an improved inkjet printing scheme is studied via LBM, which involves the evaporation of nanoparticle (NP) laden drops from chemically heterogeneous substrates. A 3D LBM model for diffusion-limited evaporation along with an Eulerian treatment of NPs produces accurate results in the experimental regime of particle concentration < 1 wt%. Movement and pinning of the contact line at various points on the hydrophilic pattern are observed to produce the final shape of the deposition. Similarly, process parameters like pattern shape, length, surface energy and patch shape also alter the final NP microstructure. Furthermore, drop evaporation from angular hydrophilic wedge patterns is studied separately using the same LBM methodology. The wedge angle is found to affect the drop unpinning behaviour, evaporative flux distribution and evaporation rate.

सारांश

लैटिसबोल्ट्जमैनविधिकाउपयोगबॉटम-अपऔरडायरेक्टेडसेल्फ-असेंबलीकेलिए

लैटिसबोल्ट्ज़मैनमेथड(एलबीएम) ऑटोमोटिव, एयरोस्पेस, ऊर्जा और भूविज्ञान के क्षेत्रों में एक शक्तिशाली कंप्युटेशनल फ्लूईडडाइनमिक्स(सीएफडी)की तकनीक के रूप में उभर रहा है।काइनेटिक सिद्धांत पर आधारित, एलबीएम पारंपरिक सीएफडी तकनीको की तुलनामें मेसोस्कोपिक भौतिकी को बेहतर ढंग से शामिल करने की अनुमति देता है। नतीजतन, एलबीएम मे नैनो और माइक्रोस्केलसेल्फ असेंबली के क्षेत्र में चुनौतियों का सामना करने की क्षमता है।इस थीसिस में, एलबीएम दो क्षेत्रों में प्रयोग किया गया है:बॉटम अप और डायरेक्टे डसेल्फ-असेंबली। इन अनुप्रयोगों के लिए एलबीएम के दायरे और व्यवहार्यता का मूल्यांकन किया जाता है। पहले, 3 डीएम्फीफिलिक जेनस पार्टिकल(जेपी)की सेल्फ असेंबली को सीमा और सीमारहित वातावरणों में थर्मल फ्लक्चुयेशन्स के समावेश के साथ स्थापित किया गया है।मॉलेक्युलर डाइनमिक्स(एमडी)से अनिसोट्रोपिकपार्टिक लपोटेन्षियल के समावेश के साथ साथ एक नयी पार्टिकल सामयिक सीमास्थिति प्रस्तावित है। क्लस्टर परिमाण वितरण, आकार, संख्याघनत्व और ओरियेंटेशन प्रोफाइल के प्रारंभिक परिणाम साहित्य में इसीएमडी अध्ययन से सहमत हैं। यह सॉफ्ट मैटर के लिए एलबीएम का विस्तार करता है और इसके महत्व और सीमाओं पर प्रकाश डालता है। इसके बाद, एलबीएम के माध्यम से एक बेहतर इंकजेट प्रिंटिंग योजना का अध्ययन किया जाता है, जिसमें रासायनिक रूप से संशोधित सब्सट्रेट्स पर नेनो पार्टिकल (एनपी)से भरी बूंदों का वाष्पी करण शामिल होता है। एक3 डीएलबीएम मॉडल डिफेयूषन सीमित वाष्पीकरण और यूलेरियन एनपी उपचार के साथ <1wt% पार्टिकल एकाग्रता के प्रायोगिक क्षेत्र में सटीक परिणाम उत्पन्न करता है। हाइड्रोफिलिक पैटर्न के विभिन्न बिंदु ओंपरतरल सीमारेखा की गति और पिनिंग को एन पी संरचना के अंतिम आकार निर्माण का कारण माना गया हैं। इसी तरह, पैटर्न आकार, लंबाई, सतह ऊर्जा और पैच आकार जैसे प्रक्रिया पैरामीटर भी अंतिम एनपी सूक्ष्म संरचना को बदलते हैं। इसके अलावा, कोणीयहाइड्रोफिलिकपैटर्नसेड्रॉपवाष्पीकरण का पिछली एलबीएम पद्धति का उपयोग करके अलग से अध्यन किया जाता है।कोणीयएंगल ड्रॉप अन पिनिंग व्यवहार, बाष्पीकरणीय फ्लक्सवितरण और वाष्पी करण दर को प्रभावित करता पाया गया है।