

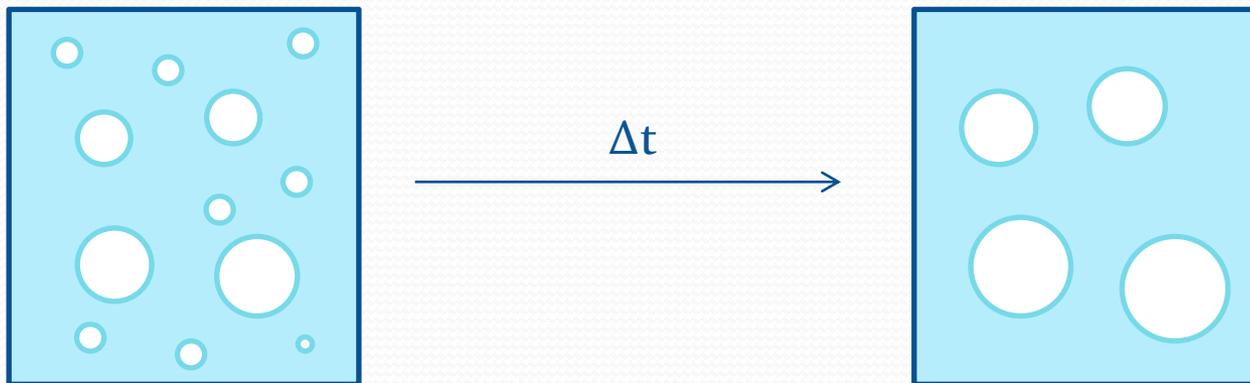
# Ostwald ripening in multiple-bubble nuclei

Hiroshi Watanabe, Masaru Suzuki, Hajime Inaoka,  
and Nobuyasu Ito

DOI: [10.1063/1.4903811](https://doi.org/10.1063/1.4903811)

# Proposta do artigo

- Validação da teoria LSW para sistemas com bolhas;

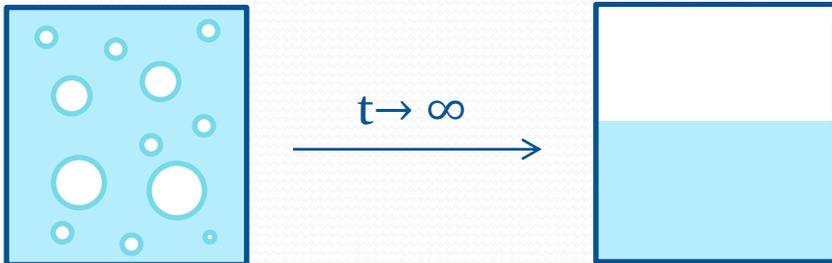


# I. Introdução

- Amadurecimento de Ostwald;
- Teoria LSW:
  - Lifshitz e Slyozov → amadurecimento limitado por difusão;
  - Wagner → amadurecimento limitado por interface;
  - Duas suposições críticas:

## Lei de Conservação

- $t \rightarrow \infty ; \frac{dV_G}{dt} = 0;$



## Tratamento de Campo Médio

- As múltiplas interações partícula-partícula são substituídas por um campo médio atuando em uma.

## II. A Teoria do Amadurecimento de Ostwald

- função distribuição  $f(v, t)$ ;

- $n(t) \equiv \int_0^\infty f(v, t) dv$ ;

- $V_G(t) \equiv \int_0^\infty v f(v, t) dv$ ;

- $\bar{v}(t) \equiv \frac{V_G}{n(t)}$ ;

- $F(v, t) \equiv n(t)^{-1} \int_0^v f(v, t) dv$ ;

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial v}(\dot{v}f)$$

Eq. de continuidade

$$f(v, t) \sim t^\gamma \tilde{f}(vt^{-x})$$

$$\dot{v}(v, t) \sim t^\omega \check{v}(vt^{-x})$$

Forma auto-similar

$$t \rightarrow \infty : \frac{dV_G}{dt} = 0$$

lei de conservação

## II. A Teoria do Amadurecimento de Ostwald

- função distribuição  $f(v, t)$ ;

- $n(t) \equiv \int_0^{\infty} f(v, t) dv$ ;

- $V_G(t) \equiv \int_0^{\infty} v f(v, t) dv$ ;

- $\bar{v}(t) \equiv \frac{V_G}{n(t)}$ ;

- $F(v, t) \equiv n(t)^{-1} \int_0^v f(v, t) dv$ ;

$$y = 2x ; \omega = x + 1$$

Comportamentos assintóticos

$$n(t) \sim t^{-x}$$

$$\bar{v}(t) \sim t^x$$

$$F(v, t) \sim \tilde{F}(vt^{-x})$$

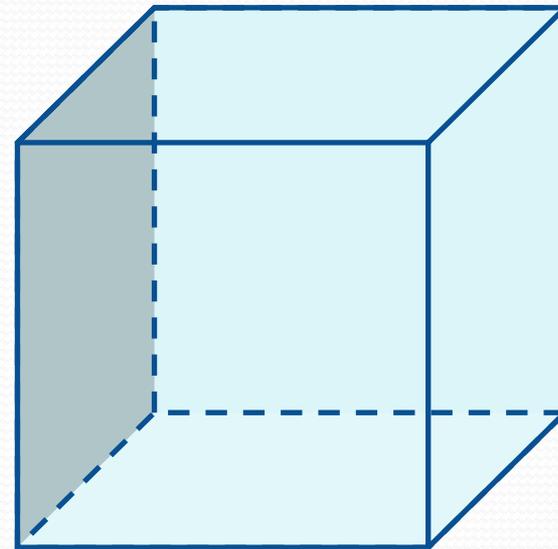
# III. Métodos

- Potencial truncado de Lennard-Jones:

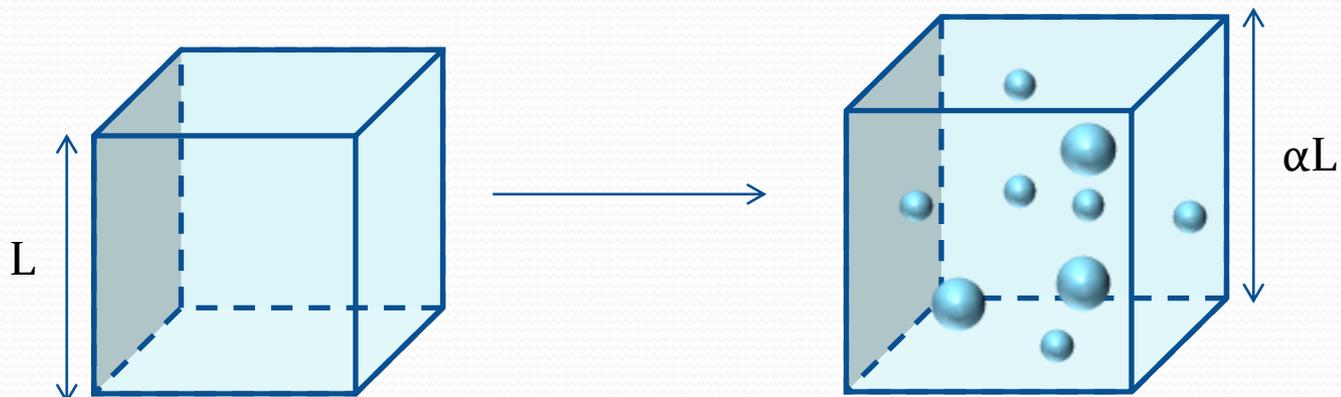
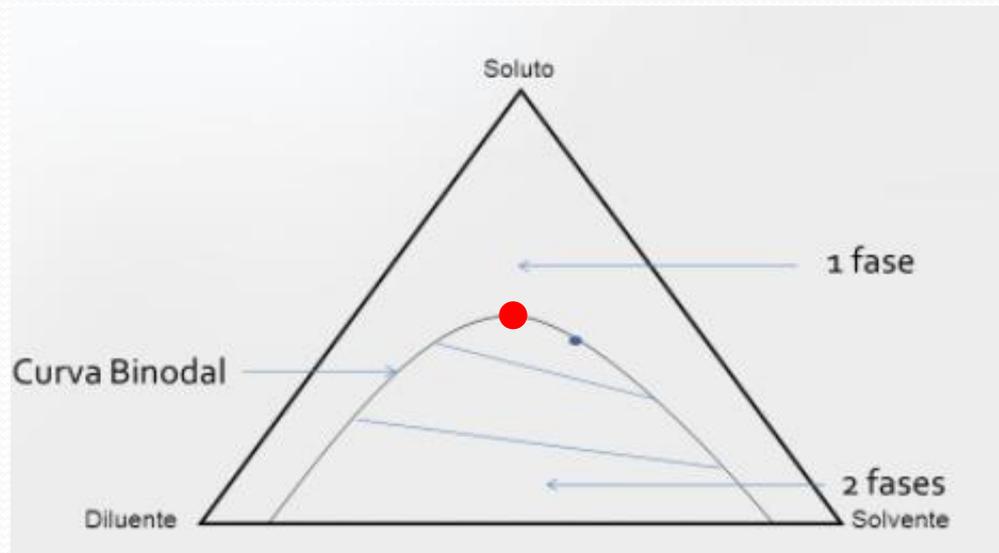
$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 + c_2 \left(\frac{r}{\sigma}\right)^2 + c_0 \right]$$

- $\varepsilon$  : profundidade do poço;
- $\sigma$  : diâmetro atômico;

- $T = \frac{3K}{2}$ ;



# III. Métodos

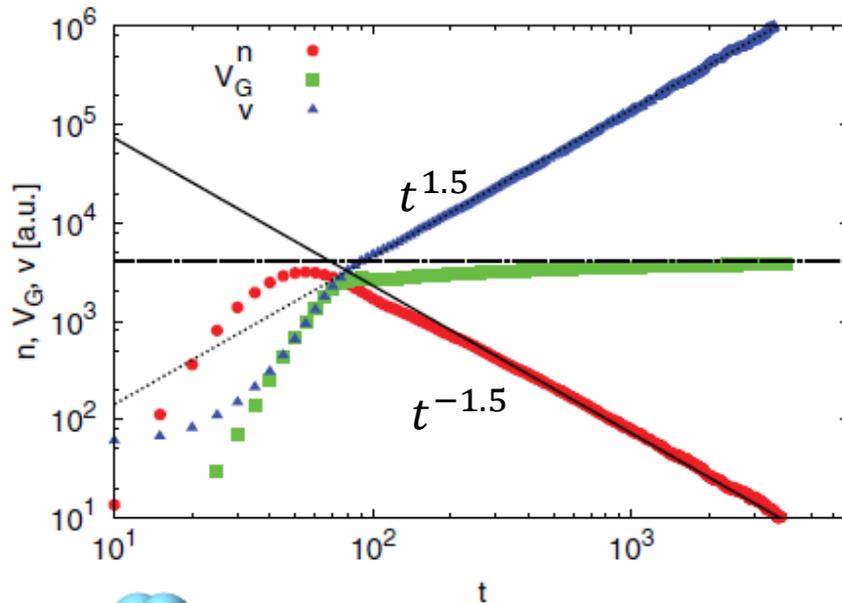


# III. Métodos



- $F(v, t)$  para definir o tamanho do sistema;
- $10^4$  steps de termalização e  $10^6$  steps de observação;
- $679 \cdot 10^6$  partículas;
- 24 horas de simulação.

# IV. Resultados

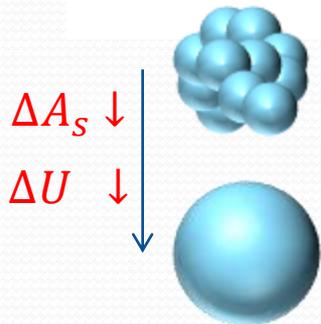


- $t > 100$ :
- $V_G \sim cte$ ;
- Região de escala;
- $\frac{dV_G}{dt} \neq 0$ ;

Sistema microcanônico  $\rightarrow \Delta E = 0$

$$\Delta U \downarrow \therefore \Delta K \uparrow$$

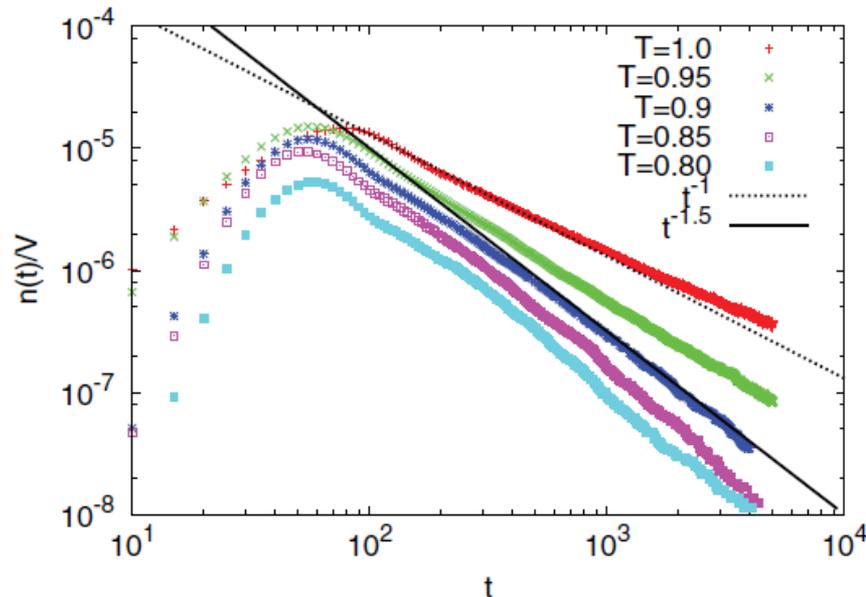
$$T = \frac{3K}{2}$$



$$d = 0.1\mu\text{m} \rightarrow A_s = 314000\text{cm}^2$$

$$d = 1\text{cm} \rightarrow A_s = 3.14\text{cm}^2$$

# IV. Resultados



- Dependência do termo de escala em relação à temperatura;

- $T: 0.9 \rightarrow 1.0 \quad \therefore \quad x: t^{-1.5} \rightarrow t^{-1}$

- $x = t^{-1.5} \rightarrow R(t) \propto t^{\frac{1}{2}}$

Amadurecimento limitado pela interface

- $x = t^{-1} \rightarrow R(t) \propto t^{\frac{1}{3}}$

Amadurecimento limitado por difusão

# IV. Resultados

Análise em termos de núcleos de bolhas

↑↑Evaporação/condensação

- Dinâmica regida por difusão;
- A partir da lei de Fick, temos:

$$\dot{v} \propto t^0 \left[ \left( \frac{v}{v_c} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]$$

$$\omega = 0 \quad \therefore x = 1 \rightarrow R(t) \propto t^{\frac{1}{3}}$$

$$\dot{v}(v, t) \sim t^\omega \check{v}(vt^{-x})$$

↓↓Evaporação/condensação

$$\Delta\mu \neq 0$$

- Dinâmica regida pela diferença de potencial químico através da superfície;

$$\dot{v} \propto t^{x(d-2)/d} \left[ \left( \frac{v}{v_c} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right]$$

$$x = d/2 \xrightarrow{3d} x = 3/2 \rightarrow R(t) \propto t^{\frac{1}{2}}$$

$$y = 2x; \omega = x + 1$$

# V. Conclusões

- Foi possível confirmar o comportamento de escala ( $t^{\frac{1}{3}}$  e  $t^{\frac{1}{2}}$ );
- A teoria LSW funciona muito bem para núcleos de bolhas, com o sucesso atribuído à separação das escalas temporais;
- A pressão do sistema é praticamente homogênea, logo, as bolhas são submetidas à mesma pressão ao longo do tempo, o que justifica o tratamento de campo médio;
- A conservação do volume total do gás sugere uma separação das escalas temporais de evolução do volume e da área superficial;
- O aumento em  $T$  é a força motriz do amadurecimento de Ostwald.