

Simulations de systèmes bi-phasiques hors équilibre

Holger A. Maier*, Manfred J. Hampe*, Philippe A. Bopp**

*Fachgebiet Thermische Verfahrenstechnik, Technische Universität Darmstadt

**Department of Chemistry, Université Bordeaux 1

Nous avons étudié par dynamique moléculaire hors-équilibre (NEMD) un nombre de mélanges binaires de particules 'Lennard-Jones' partiellement miscibles. Les compositions furent choisies telles que deux interfaces soient observées dans la boîte de simulation. Soumis à des gradients de température, des convections sont observées près des interfaces; c'est l'effet thermocapillaire ou effet de Marangoni, qui pourrait jouer un rôle non-négligable lors du transport de molécules à travers d'interfaces, p.ex. en extraction liquide-liquide.

(1) MD Simulations of the Soret Effect in Simple Partially Miscible Binary Biphasic Mixtures

H. A. Maier, M. J. Hampe, and Ph. A. Bopp, Chem.Phys.Let. 518, 55-60 (2011).

(2) Non-Equilibrium Molecular Dynamics Simulation of the Thermocapillary Effect

H. A. Maier, Ph. A. Bopp, and M. J. Hampe, Can.J.Chem.Eng. 90, 833 (2012).