

DETERMINAÇÃO DO POTENCIAL ZETA EM COLÓIDES

BRAGA, Tiago A.¹; DIEHL, Alexandre²

Universidade Federal de Pelotas – Licenciatura em Física – Departamento de Física

¹tiago.fisica@gmail.com; ²diehl@ufpel.edu.br

1 INTRODUÇÃO

O estudo termodinâmico de sistemas compostos por diversos tipos de espécies químicas é uma tarefa nem sempre muito simples. Abordagens teóricas que procuram descrever de forma detalhada cada um dos constituintes, por mais simples que estes sejam, nem sempre são bem sucedidas, uma vez que o número de graus de liberdade nestes sistemas costuma ser muito grande. Uma alternativa é a redução do sistema aos seus constituintes essenciais, por exemplo, através da simulação computacional. A proposta deste projeto é estudar um sistema composto por colóides, definidos como macromoléculas altamente carregadas eletricamente, e micropartículas carregadas com a carga oposta e igual a dos colóides. O solvente, no qual em geral estas estruturas estão imersas, é a água, que no nosso modelo reducionista não é representado de forma explícita, ou seja, não tem estrutura, sendo definido apenas por seu valor de constante dielétrica. Dentre as propriedades que estamos interessados em descrever, tais como a configuração de equilíbrio das micropartículas em torno do colóide, a determinação do potencial zeta é nosso objetivo. O potencial zeta é definido como o potencial eletrostático na região que separa as micropartículas condensadas à superfície do colóide, em função da sua adsorção eletrostática, das micropartículas livres na solução.

2 METODOLOGIA

A metodologia de trabalho deste projeto envolve a utilização de simulação computacional, através do uso do pacote ESPResSo, desenvolvido pelo grupo do Prof. Christian Holm no Instituto Max-Planck de Mainz, Alemanha. De maneira bem geral, o pacote foi desenvolvido para realizar simulações em Dinâmica Molecular para uma classe de problemas de matéria condensada mole, em especial, para sistemas onde a interação eletrostática desempenha papel importante. As interações entre as partículas são descritas por potenciais clássicos e pré-definidos, cuja intensidade é definida pela posição relativa entre as partículas. Para obtenção dos resultados será utilizado o algoritmo da Dinâmica Molecular, técnica que consiste na solução numérica das equações de movimento de cada partícula do sistema.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nosso sistema de estudo está confinado numa esfera de paredes rígidas (ou célula de Wigner-Seitz WS), onde o colóide é fixado no centro da esfera e as micropartículas estão dispostas de forma aleatória. As interações relevantes

são de origem eletrostática, do tipo Coulomb, e de curto alcance via potencial Lennard-Jones. A temperatura do sistema é mantida constante através da utilização do chamado comprimento de Bjerrum, definido como a razão entre a energia eletrostática de contato e a energia térmica. Para um solvente formado pela água e a temperatura ambiente, o comprimento de Bjerrum vale 7.2 Å. Nas nossas simulações foram usadas um total de 401 partículas, conforme Tab 1. A Fig. 1 nos dá uma ideia visual da simulação que foi obtida através do pacote ESPReSso.

Partícula	Numero de Partículas	Carga Unitária
Colóide	1	-200.0
Contra-Íon	200	1.0
Sal Positivo	100	1.0
Sal Negativo	100	-1.0

Tabela 1 – Partículas presentes na simulação.

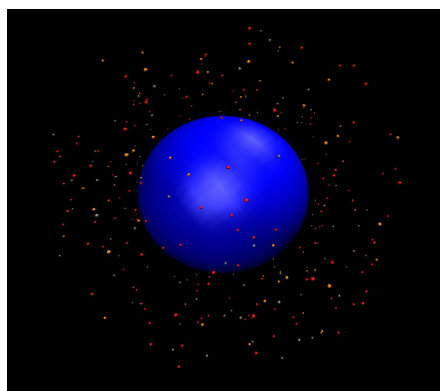


Figura 1 – Coloide, contra-íons e sal em suspensão.

As propriedades são analisadas quando o sistema atinge o equilíbrio. Do ponto de vista computacional, este estágio é obtido quando as propriedades do sistema em estudo oscilam em torno de um valor médio de equilíbrio. Numa simulação típica, o equilíbrio é atingido após o tempo de termalização ou de equilibração. Nesta etapa, a memória da configuração inicial do sistema é perdida, o que é essencial para a determinação do equilíbrio, e nenhuma propriedade do sistema deve ser calculada. Na Fig. 2 apresentamos o comportamento da energia eletrostática total do sistema, em função do número de passos de simulação (ou de forma correspondente com o tempo de simulação). Como pode ser percebido, o valor desta energia oscila em torno de um determinado valor, tomado como o valor de equilíbrio para o sistema. Além disto, percebe-se que a energia é negativa, o que é uma indicação da forte

interação atrativa presente no sistema entre as micropartículas em suspensão e o colóide, fortemente carregado.

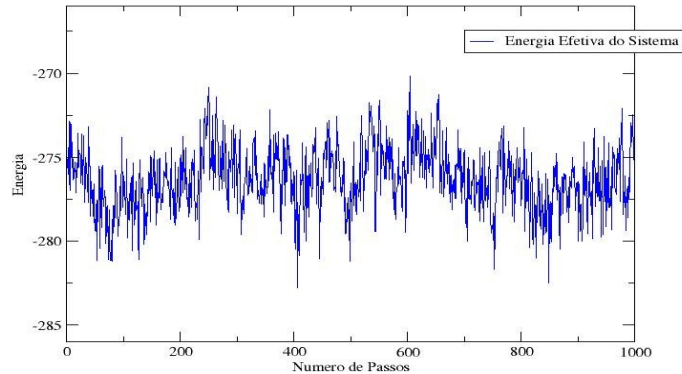


Figura 2 – Energia eletrostática do sistema coloidal em função do número de passos de simulação.

A energia negativa presente na Fig. 2 serve como evidência da forte adsorção das micropartículas sobre a superfície do colóide. Assim, espera-se que o perfil do potencial eletrostático em torno do colóide represente esta condensação. Em particular, o potencial eletrostático na posição que separa a região de adsorção da região livre, ou potencial zeta, pode ser calculado. O problema é que o pacote ESPResSo não fornece de forma direta o perfil de potencial eletrostático. Ao invés disto, o pacote fornece o perfil de densidade dentro da célula de WS. A partir deste perfil, pretendemos calcular o perfil de potencial eletrostático. Esta etapa ainda está em desenvolvimento.

4 CONCLUSÕES

Os resultados discutidos acima mostram que o pacote ESPResSo é capaz de reproduzir com sucesso algumas das propriedades de soluções coloidais. Além disto, a utilização do pacote é relativamente simples, com grande flexibilidade de utilização.

5 REFERÊNCIAS

LIMBACH, H.-J., ARNOLD, A., Mann, B. A., e HOLM, C. ESPResSo – An Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter Systems. *Comput. Phys. Commun.* 174(9) (704-727), 2006.

DIEHL, A. LEVIN, Y. Statistics vs. Dynamics: two methods for calculating the effective charge of colloidal particle. *J. Phys.: Condens. Matter.* 17, S3309, 2005.