



Teoria e simulação de sistemas complexos - Estabilização de sistemas coloidais

Autor(es): PINHEIRO, Leonardo; DIEHL, Alexandre

Apresentador: Leonardo Pinheiro

Orientador: Alexandre Diehl

Revisor 1: Paulo Sérgio Kuhn

Revisor 2: Victor Gonçalves

Instituição: Universidade Federal de Pelotas

Resumo:

Para um sistema composto por vários tipos de espécies químicas, as interações microscópicas entre seus constituintes determinam o comportamento das propriedades termodinâmicas do sistema, como é o caso da conformação de estabilização do mesmo. Procuramos neste projeto estudar como se dá a estabilização de sistemas que contém colóides, eletrólitos e polieletrólitos. Para tanto, utilizamos o ferramental da simulação computacional em Dinâmica Molecular. De maneira bem breve, confinamos numa caixa de simulação polieletrólitos (polímeros formados por monômeros com cargas iguais e unitárias) e seus contraíons (íons com carga elétrica oposta a dos monômeros que formam a cadeia polimérica), uma vez que o sistema deve ser eletricamente neutro. Além destes, a solução contém uma certa concentração de colóides, macromoléculas fortemente carregadas e com dimensões na escala nanométrica. As interações microscópicas relevantes são de origem eletrostáticas, ligadas ou não, e de curto alcance, como são as de volume excluído. A dinâmica do sistema para a configuração de equilíbrio é obtida através da solução das equações de movimento para cada partícula, utilizando o algoritmo de Dinâmica Molecular. Uma vez obtido este equilíbrio, podemos calcular diversas propriedades de equilíbrio, como por exemplo, raio de giro do polímero, definido como o valor quadrático médio das partes da cadeia ao centro de gravidade ou a um dado eixo da estrutura, a carga efetiva dos polímeros e colóides, pois em função da interação eletrostática se espera que os contraíons, polímeros e colóides formem estruturas agregadas. Analisamos a estabilidade destas estruturas com a variação da temperatura, tipo de solvente, etc, variando o chamado comprimento de Bjerrum, definido como a razão entre a energia eletrostática de contato e a energia térmica. Assim, podemos variar a intensidade da interação eletrostática simplesmente mudando o valor do comprimento de Bjerrum. Diversos regimes são assim explorados, caracterizando as propriedades termodinâmicas do sistema, comparando com resultados experimentais e teóricos da literatura.