



SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



Evento	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2016
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Estudo Computacional de Suspensões Coloidais e Sal
Autor	LUCAS NUNES LOPES
Orientador	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Estudo Computacional de Suspensões Coloidais e Sal

Autor: Lucas Nunes Lopes - Orientador: Prof. Alexandre P. dos Santos
Universidade Federal do Rio Grande do Sul - Instituto de Física

O trabalho realizado trata do estudo de suspensões coloidais e sais num meio aquoso, baseando-se na teoria de Poisson–Boltzmann (PB) e no método de Monte Carlo (MC) para simulações. No trabalho a teoria de PB é desenvolvida e comparada com as simulações de MC, sendo o intuito comparar os perfis de densidade iônicos a partir de ambos métodos. A teoria de PB prediz bem as distribuições de contra-íons e co-íons para suspensões com eletrólitos 1:1 – sal de valência 1 - com raio dos íons (r_c) “pequenos” - $r_c = [1 - 3]\text{Å}$. A concordância com dados de simulação é perfeita. A teoria falha, porém, quando na presença de íons multivalentes ou íons grandes (maiores valores de r_c), onde a correlação entre os íons deve ser considerada; aqui há divergências entre a teoria e simulação. No trabalho são apresentadas essas diferenças e discutidas possíveis soluções, focando nos casos de maiores raios iônicos.

Utilizamos o modelo de cela de Wigner–Seitz: um colóide de raio a e carga $-Zq$, onde q é a carga do próton, no centro de uma cela esférica de raio R . Dentro da cela há um número de Z/α contra-íons com carga αq ; N_s contra-íons de carga αq e αN_s co-íons com carga $-q$, de modo a garantir a neutralidade elétrica, onde N_s é o número de partículas de sal. Todos os íons possuem raio r_c . O solvente é considerado um meio sem estrutura, de constante dielétrica ϵ . O comprimento de Bjerrum, definido como $\lambda_B = q^2/k_B T \epsilon \approx 7,2\text{Å}$, valor que modela a água a temperatura ambiente. As simulações foram feitas utilizando o método de MC, mais precisamente o algoritmo de Metropolis. Considerou-se simplesmente a energia eletrostática entre os íons carregados. O objetivo das simulações é, após alcançado o equilíbrio, criar várias amostras com as posições das partículas e gerar histogramas relacionando a densidade de partículas com a distância das mesmas até o centro da cela, diferenciando co-íons e contra-íons e considerando a média de todas as amostras.

A teoria foi desenvolvida numericamente, a partir da equação de Poisson-Boltzmann e da relação entre o campo, \vec{E} e o potencial elétrico ϕ :

$$\nabla^2 \phi(r) = -\frac{\rho(r)}{\epsilon}; \quad \vec{E} = -\nabla \phi,$$

onde $\rho(r) = \sum_i A_i \exp[-q_i \beta \phi(r)]$ é o termo que engloba as densidades das partículas negativas e positivas, onde A_i são as constantes de normalização e q_i são as cargas das espécies i presentes no sistema. Para a resolução das integrais usamos um método de iteração. Para a convergência da solução usou-se um limite de 10^{-15} referente ao erro absoluto. Os resultados obtidos são comparados com os resultados obtidos das simulações.

Usando parâmetros em que sabe-se da validade da equação de PB, a comparação entre os resultados das simulações com a teoria comprova a eficácia da teoria desenvolvida para descrever os sistemas de interesse. Isso nos permite tentar melhorias na equação, para descrever satisfatoriamente os casos em que esta perde a validade e não concorda com os resultados obtidos de simulação. Uma primeira tentativa, será buscar na literatura uma modelagem alternativa para os íons maiores levando em conta seu raio efetivo elevado.