

SALÃO DE
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
XXIX SIC
**UFRGS**
PROPESQ



múltipla 
UNIVERSIDADE
inovadora  inspiradora

| | |
|-------------------|---|
| Evento | Salão UFRGS 2017: SIC - XXIX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS |
| Ano | 2017 |
| Local | Campus do Vale |
| Título | Efeito de tamanho dos íons na equação de Poisson-Boltzmann |
| Autor | LUCAS NUNES LOPES |
| Orientador | ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS |

Efeitos de tamanho dos íons na equação de Poisson-Boltzmann

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

O trabalho a ser apresentado consiste da demonstração dos resultados do estudo realizado no último ano, já aceito para publicação na revista *Journal of Chemical Physics*. Além disso, será apresentada a continuação do estudo, para sistemas mais complexos.

Nesse projeto, foi feito um estudo sobre suspensões coloidais e sais num meio aquoso, baseado na teoria de Poisson-Boltzmann (PB) e no método de Monte Carlo (MC) para simulações. Basicamente o sistema consiste de um coloide imerso em um meio aquoso, juntamente com sal. Em variações desse sistema, comparou-se perfis de densidade radial originados do desenvolvimento numérico da teoria e das simulações. A teoria de PB prediz com acurácia apenas alguns casos específicos (eletrólitos 1:1 - sal de valência 1 - e raio pequeno dos íons), então, com o intuito de melhorar a descrição dos resultados, aplicou-se uma modificação na teoria de PB (mPB). Na apresentação, mostrarei os resultados obtidos deste trabalho. Ainda, dando continuidade ao estudo, será considerado um sistema base com mais de um coloide, avaliando grandezas como a força entre eles.

A teoria foi desenvolvida numericamente, à partir da equação de PB e da relação entre o campo elétrico E e o potencial elétrico ϕ :

$$\nabla^2\phi(r) = -4\pi\frac{\rho(r)}{\epsilon}; \quad E = -\nabla\phi$$

em que $\rho(r)$ é o termo que engloba as densidades das partículas negativas e positivas. Para a resolução das integrais usamos o método iterativo para calcular o campo e a partir dele o potencial. Para a convergência da solução usou-se um limite de 10^{-15} referente ao erro absoluto.

Nas simulações utilizamos o modelo de cela de Wigner-Seitz da seguinte forma: um coloide de raio a e carga $-Zq$, no centro de uma cela esférica de raio R . Dentro da cela há um número de $\frac{Z}{\alpha}$ contra-íons com carga αq e ainda o "sal", representado por N_s cátions de carga αq e αN_s ânions com carga $-q$, de modo a garantir a neutralidade eletrônica. Todos os íons possuem raio R_c . O solvente é considerado um meio sem estrutura à temperatura ambiente. As simulações foram feitas pelo método de MC, usando o algoritmo de Metropolis. Considerou-se a energia eletrostática e de "hard core" (evitando que duas partículas ocupem o mesmo espaço).

Dos resultados, vemos que a teoria mPB desenvolvida, mostrou ótima concordância com as simulações de MC.

Nos novos sistemas, há dois coloides posicionados simetricamente sobre o eixo X dentro da cela, com $2\frac{Z}{\alpha}$ cátions, mais o sal. A força entre os coloides será calculada somando a força de Coloumb com a força entrópica, sendo esta:

$$F_{en} \propto \frac{\langle N^c \rangle - \langle N^f \rangle}{2\Delta R}$$

em que ΔR é um possível deslocamento dos coloides, N^c é o número de sobreposições que aconteceriam dos colóides com os íons menores, se o deslocamento aproximasse os coloides e N^f o número de superposições caso o deslocamento afastasse os coloides.