



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
Título	Simulação de sistemas não neutros periódicos 1D: Escoamento eletrosmótico em um nanoporo carregado
Autor	ROGÉRIO KACIAVA BOMBARDELLI
Orientador	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Autor: Rogério Kaciava Bombardelli
Orientador: Prof. Alexandre P. dos Santos
Órgão de fomento: CNPq

Simulação de sistemas não neutros periódicos 1D: Escoamento eletrosmótico em um nanoporo carregado

Ao ser confinado no interior de um cilindro, um fluido carregado (solução de solvente e íons), dependendo do material do qual este é fabricado, pode ocorrer uma concentração de cargas elétricas na superfície do cilindro, fenômeno comum em cilindros de vidro. Essas cargas concentradas na superfície do material afetam significativamente o escoamento eletrosmótico – situação na qual um campo elétrico é aplicado longitudinalmente no cilindro levando os íons a se moverem devido às interações eletrostáticas, e esses por sua vez carregando as partículas de solvente consigo devido às interações mecânicas. O estudo desse tipo de sistema tem aplicações muito importantes em diversas áreas, como química e biologia: pode ser utilizado em métodos de dessalinização de água, análise e separação de células sanguíneas e DNA, além de auxiliar no estudo de supercapacitores. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um método que possibilite a simulação desse tipo de fenômeno de forma mais rápida e eficiente comparado aos métodos já utilizados e mantendo a acuracidade dos resultados. As simulações foram realizadas em linguagem C, utilizando a técnica DPD (dissipative particle dynamics), para as interações mecânicas e o método de Ewald para as interações eletrostáticas. Após as simulações foram comparados os resultados obtidos através do novo método com os resultados obtidos através dos métodos anteriores. Também comparamos nossos resultados com as previsões da teoria de Poisson-Boltzmann. Essas comparações possibilitaram a validação do novo método, e ainda observamos uma significativa redução no tempo de simulação.