



Conectando vidas  
Construindo conhecimento



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2021
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Estudo do comportamento eletro-osmótico de sistemas eletrolíticos
<b>Autor</b>	IGOR MORAIS TELLES
<b>Orientador</b>	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Estudo do comportamento eletro-osmótico de sistemas eletrolíticos

Aluno: Igor Morais Telles

Orientador: Prof. Dr. Alexandre P. dos Santos

Interações eletrostáticas foram estudadas através de simulações computacionais do escoamento eletro-osmótico. Esse é um fenômeno eletrocinético que ocorre quando um fluido carregado – solução de íons e solvente – é confinado por um material dielétrico, e ao aplicar um campo elétrico externo paralelo às paredes que o confinam, os íons presentes no fluido são induzidos a escoar; carregando as partículas de solvente consigo. Esse tipo de escoamento possui grande relevância para física, química e biologia devido suas aplicações em micro aparelhos para análise, síntese e separação de substâncias como células sanguíneas e DNA, como também no estudo da Dupla Camada Elétrica, importante para a estabilização de coloides. Foram realizadas simulações baseadas em dinâmica molecular onde as interações de natureza mecânica são computadas pelo método *Dissipative Particle Dynamics*, enquanto as interações eletrostáticas tratadas pelo método das Somas de Ewald. Ao longo da Iniciação Científica foi possível publicar três artigos, sendo o primeiro o estudo do escoamento eletro-osmótico confinado por placas paralelas, discutido em *Electroosmosis as a probe for electrostatic correlations* onde pela primeira vez os efeitos de correlação eletrostática são observados com fenômenos de difusão. Já em *Electroosmotic flow grows with electrostatic coupling in confining charged dielectric surfaces* foram apresentadas, pela primeira vez, as implicações dos efeitos de polarização superficial no escoamento eletro-osmótico. E, por último, em *Simulations of electroosmotic flow in charged nanopores using Dissipative Particle Dynamics with Ewald Summation* uma correção no método de Ewald para um sistema de uma dimensão e não-neutro foi apresentada, que traz maior eficiência computacional, em comparação com formas convencionais que este tipo de geometria é tratada, além de tornar o sistema mais realístico e simples de modelar. Com a experiência obtida nos trabalhos supracitados, seguiremos estudando a eletro-osmose e a polarização superficial em novas geometrias e o comportamento destes sistemas com a adição de polieletrólitos.