

MODELAGEM NUMÉRICA DE AUTO-ORGANIZAÇÃO DE SISTEMAS COLOIDAIS DO TIPO PATCHY

XXXVII Encontro de Iniciação Científica

Ewerton da Silva Costa, KAIQUE GRACIA DE SÁ BILLOTTA, Wandemberg Paiva Ferreira

Auto-organização é um princípio fundamental que gera padrões estruturais em todas as escalas, podendo variar de moléculas à galáxias. Tal fenômeno é definido como um processo no qual partes ou componentes desordenados de um sistema pré-existente formam padrões estruturais. A simulação e reprodução dessas estratégias de organização e novas moléculas com a habilidade de se auto-organizarem é uma técnica bastante relevante em nanotecnologia e materiais funcionais. Em sistemas do tipo matéria mole ou fluidos complexos (coloides, polímeros, etc), as ligações são facilmente quebradas e reformadas, permitindo que o sistema se reorganize em diferentes formas. Avanços em técnicas experimentais permitem a sintetização de partículas coloidais decoradas com sítios ativos (patches), de modo que cada sítio ativo pode funcionalizar a superfície da partícula coloidal. Diferentemente do coloide padrão, cuja interação é, em geral, isotrópica, partículas patchy são coloides cuja interação é anisotrópica, resultando em estruturas que são determinadas pela anisotropia específica dessa interação, e que estão associadas, fortemente, à distribuição dos sítios ativos sobre o coloide. Como consequência, partículas patchy constituem um sistema bastante promissor para formação de materiais funcionais. Neste trabalho, estudamos a auto-organização de partículas patchy carregadas assimétricas (com uma carga central e sítios ativos com carga de sinal oposto) através da técnica computacional de dinâmica molecular. Mostramos que, para um sistema de partículas patchy carregadas assimétricas, com dois sítios ativos, onde varia-se o ângulo inicial com relação ao eixo padrão, inicialmente a 180° entre as patches, a interação resultante pode ser modificada de acordo com a carga líquida de cada partícula e a polarização devido a distribuição de cargas sobre a superfície, resultando em: monômeros, aglomerados de tamanho variado, estruturas lineares e agregado percolante.

Palavras-chave: Partículas Patchy. Partículas Patchy Carregadas. Dinâmica Molecular. Materiais Funcionais.