

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

XXXVII Encontro de Iniciação Científica

Kaique Gracia de Sa Billotta, EWERTON DA SILVA COSTA, Wandemberg Paiva Ferreira

Auto-organização é um princípio fundamental que gera organização estrutural 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. Em sistemas do tipo matéria mole (coloides, polímeros, etc), as ligações são facilmente quebradas e reformadas, permitindo assim que o sistema se reorganize de diferentes formas, resultando na formação de muitos agregados. Avanços em técnicas experimentais, permitiram a criação de partículas coloidais blindadas com sítios ativos, ou patches, gerando diferentes funcionalidades nessas partículas. Diferentemente do coloide padrão, que tem muitos estados agregados, as partículas do tipo patchy formam estruturas com um estado fundamental, que é regido pela anisotropia específica da interação. Um sistema com essas partículas, portanto, surge como um dos mais promissores para se alcançar o controle necessário da forma e da interação entre blocos constituintes, para formação de materiais funcionais. Neste trabalho, fazendo uso do método computacional de dinâmica molecular, mostramos que para um sistema de partículas com dois e três sítios ativos, a interação resultante é atrativa. Ademais, para uma densidade de $\eta = 0,350$ o sistema de partículas com dois sítios ativos forma um agregado percolante, ao passo que o sistema com três sítios ativos não. Por fim, um estudo sobre a transição de fase do maior agregado como função da densidade foi realizado para o sistema com três sítios ativos, resultando em uma estimativa do valor da densidade crítica para que isso aconteça. Contudo, todos os objetivos foram cumpridos neste trabalho.

Palavras-chave: Auto-organização. patchy. dinâmica molecular. agregado.