

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE COLÓIDES DIPOLARES DE FORMATOS REGULARES VIA DINÂMICA MOLECULAR

Pedro Guilherme Matos de Holanda, Isabel de Castro Cordeiro, Jorge Luiz Bezerra de Araújo, Wandemberg Paiva Ferreira

A síntese de colóides com geometria específica é um desafio tecnológico de grande interesse científico, industrial e tecnológico, visando a obtenção de materiais funcionais em escala reduzida. Além da geometria de forma variada, é possível sintetizar partículas coloidais cuja superfície pode ser alterada, gerando uma interação resultante entre elas "controlada". Como consequência, vislumbra-se a possibilidade de gerar estruturas auto-organizadas com características controladas, de modo a serem utilizadas em aplicações específicas. Dessa forma, motivados por recentes avanços na sintetização de colóides com geometria específica, estuda-se através de simulação computacional de dinâmica molecular o comportamento coletivo e a auto-organização estrutural de um sistema bi-dimensional de colóides dipolares de geometria regulares (partículas em forma de triângulos, quadrados e pentágonos), onde um dos lados é modificado pela presença de um dipolo elétrico. Analisamos as estruturas auto-organizadas em função da densidade do sistema, campo elétrico externo aplicado e temperatura. Detalhes da estruturais obtidas são reveladas através função de distribuição radial, função de distribuição angular e número médio de coordenação. Aglomerados massivos e lineares são as estruturas mais comuns. Observa-se ainda cadeias fechadas e aglomerados espessos, de acordo com a intensidade do dipolo e campo externo.

Palavras-chave: auto-organização. colóides. dinâmica molecular. simulação computacional.