



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Efeitos de Polarização na Adsorção de Polianfolitos em Nanopartículas Metálicas
Autor	VINICIUS MENUCCI MUCCILLO
Orientador	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Efeitos de Polarização na Adsorção de Polianfolitos em Nanopartículas Metálicas

Aluno: Vinicius Menuci Muccillo
Orientador: Prof. Dr. Alexandre P. dos Santos

O estudo de nanopartículas em suspensão tem grande importância em diversas áreas, como indústria e medicina, onde o conhecimento gerado pode ser aplicado, por exemplo, no transporte de substâncias dentro do corpo humano. Motivado por essa importância, o trabalho tem por objetivo desenvolver e implementar uma simulação de dinâmica molecular para estudar o comportamento de um polianfolito - polímero onde as cargas dos monômeros é alternado - na presença de uma nanopartícula metálica, em um meio aquoso. A simulação está sendo desenvolvida na linguagem de programação C, onde a dinâmica das partículas é governada pelas equações de Langevin, integradas pelo método de Velocity Verlet. Contudo, dado o curto tempo que estamos trabalhando nesse projeto, foram obtidos por enquanto apenas os perfis de densidade iônica para um sistema mais simples de interações coulombianas de contraíons positivos com a nanopartícula negativa, e esses perfis comparados com os resultados de um outra simulação que utiliza Monte Carlo. O comportamento das duas simulações foi concordante. Além disso, começamos a implementar um polieletrólito - polímero com monômeros de mesma carga -, analisando como ele se comporta apenas com as interações eletrostáticas com a nanopartícula. Os próximos passos para a simulação serão incluir a natureza metálica da nanopartícula e terminar a implementação do polianfolito, analisando como vão se comportar no sistema.