



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	ESCOAMENTO ELETROSMÓTICO EM UM NANOPORO POLARIZADO CILÍNDRICO E CARREGADO
Autor	ROGÉRIO KACIAVA BOMBARDELLI
Orientador	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

ESCOAMENTO ELETROSMÓTICO EM UM NANOPORO POLARIZADO CILÍNDRICO E CARREGADO.

Autor: Rogério K. Bombardelli.

Orientador Prof. Alexandre P. dos Santos.

Instituição de origem: Instituto de Física, UFRGS.

Eletrólitos confinados são extremamente importantes, pois possuem aplicações que aparecem nas mais diversas áreas das ciências e engenharias, seu estudo pode gerar uma grande gama de novos dispositivos e técnicas, como supercapacitores, sensores biológicos. No último ano, realizamos a análise do fluxo eletrosmótico em um nanoporo cilíndrico carregado, os resultados deste trabalho foram submetidos e publicados em formato de artigo no periódico *Journal of Molecular Liquids*, com o título "Simulations of electroosmotic flow in charged nanopores using Dissipative Particle Dynamics with Ewald summation". No trabalho atual, continuamos estudando o fluxo eletrosmótico no nanoporo cilíndrico carregado, porém, agora passamos a considerar os efeitos de polarização no sistema. Esse efeito pode afetar significativamente o perfil de densidade iônico e, por consequência, o escoamento. O objetivo do trabalho foi avaliar o efeito da polarização no escoamento eletrosmótico, nas mais diversas concentrações de carga e, também, o efeito da adição de sal no sistema. Para o estudo da parte eletrostática da simulação, consideramos as constantes dielétricas dos meios na solução da equação de Poisson para a geometria do problema, cilíndrica. As contribuições coulombianas são separadas em potenciais de curto e longo alcance resolvidos a partir do método das somas de Ewald. As interações mecânicas entre as partículas da simulação são governadas pela técnica DPD (Dissipative Particle Dynamics) e integradas seguindo o algoritmo velocity-verlet. Ao final do trabalho, analisando os resultados percebemos que a polarização não afeta significativamente o sistema quando incluímos apenas contraions monovalentes. Porém, seu efeito foi extremamente significativo para os casos com sal 3:1 e com contraions trivalentes, chegando, em alguns casos, a ter um efeito de aumento de velocidade de cerca de 200%, validando a premissa inicial do estudo.