

INSTABILIDADE DE RAYLEIGH EM UMA GOTA LÍQUIDA. *Heitor C.M. Fernandes; J.J Arenzon, Y. Levin (IF-UFRGS)*

Há mais de duas décadas o estudo das propriedades conformacionais de longas moléculas tem recebido renovada atenção em decorrência do fato de sistemas biologicamente importantes apresentarem uma transição entre um estado onde se apresentam estendidas e outro globular compacto, que está diretamente conectada com a atividade química. Esta forma compacta pode ser tratada como uma gota líquida. Há mais de 100 anos, Lord Rayleigh notou que quando a carga de uma gota de água atinge um certo valor crítico, a forma esférica não é mais energeticamente favorável. Esta quebra de simetria é parecida com uma transição de fase termodinâmica. Para entender este problema em detalhe, pretendemos realizar uma simulação da dinâmica estocástica, baseada num modelo tipo Ising no qual para corrigir a assimetria do substrato (rede quadrada), termos de segundos vizinhos são incluídos no Hamiltoniano efetivo. Uma temperatura efetiva é introduzida através do algoritmo de Metrópolis para, mais uma vez, ajudar a contrabalançar a assimetria associada com a rede subjacente. Em particular, estamos interessados em encontrar o valor crítico da carga necessária para a gota alterar sua forma, de esférica para alguma outra, ainda desconhecida. Pretendemos construir o diagrama de fases completo em termos dos parâmetros microscópicos subjacentes que aparecem no Hamiltoniano. Também pretendemos verificar a conjectura de que a transição na forma da gota depende somente da razão da tensão superficial efetiva pela intensidade da interação eletrostática. Esperamos que a intuição obtida ao estudar este problema simples nos ajude a entender melhor o problema de polianfólitos não neutros. (CNPq)