



ADSORÇÃO DE POLÍMEROS EM SUPERFÍCIES DECORADAS COM ILHAS

Modalidade: Pesquisa | Área de Conhecimento: Ciências Exatas e Tecnológicas | Área Temática: Física Estatística

Liliane Aparecida Ferraz ¹; Tiago José de Oliveira ²

^{1,2} Departamento de Física, UFV (liliane.ferraz@ufv.br)

Introdução

Um polímero, quando em contato com uma superfície, pode ser adsorvido; ou seja, suas moléculas podem ficar retidas nessa superfície.

A interação com a superfície vai depender, em cada ponto, de suas características. A maioria dos estudos teóricos sobre a adsorção de polímeros considera superfícies nas quais todos os sítios de adsorção são equivalentes - o que pouco acontece na prática. Em geral, as superfícies são heterogêneas, isto é, formadas por espécies químicas diferentes, ou possuem degraus devido à presença de ilhas, terraços ou morros na superfície.

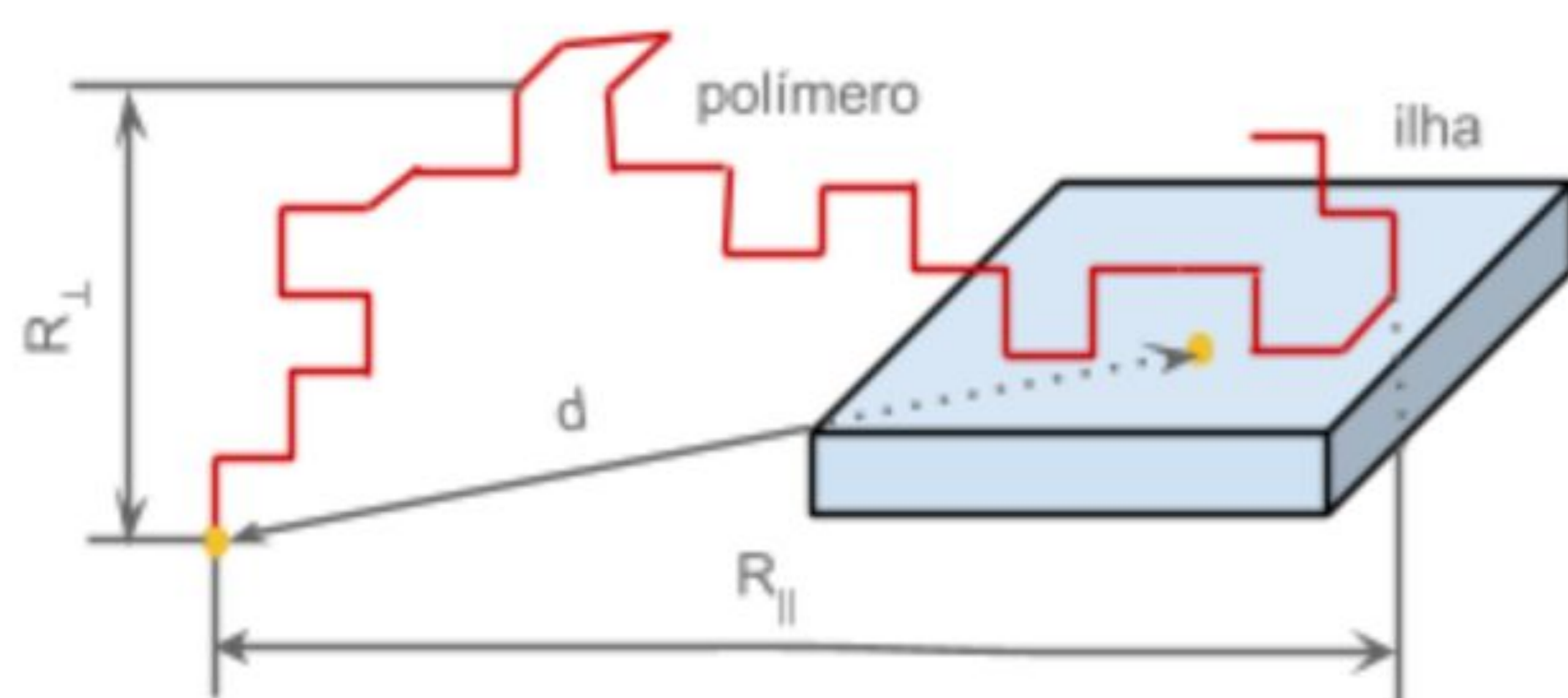
Objetivos

Estudar a adsorção de polímeros em superfícies homogêneas, mas decoradas com ilhas, por meio de simulações computacionais.

Material e Métodos

Utilizando o algoritmo de Rosenbluth, nós investigamos Self-Avoiding Walks (SAWs) em uma rede cúbica, onde os monômeros do polímero tem uma interação atrativa com cada contato (i.e., sítio primeiro vizinho) com a superfície + ilha, que pode ser um nos platôs e dois nas bordas das ilhas. Para cada contato, nós associamos um peso de Boltzmann $e^{-\omega}$ com a variável $\omega = \epsilon/k_B T$, onde ϵ é a energia de interação; T , a temperatura e k_B , a constante de Boltzmann.

Por enquanto analisamos apenas o caso de uma ilha cujo centro está a uma distância d do ponto onde o polímero está preso, conforme o esquema a seguir. A ilha possui dimensões $10 \times 10 \times 1$, enquanto cada monômero possui dimensão 1.



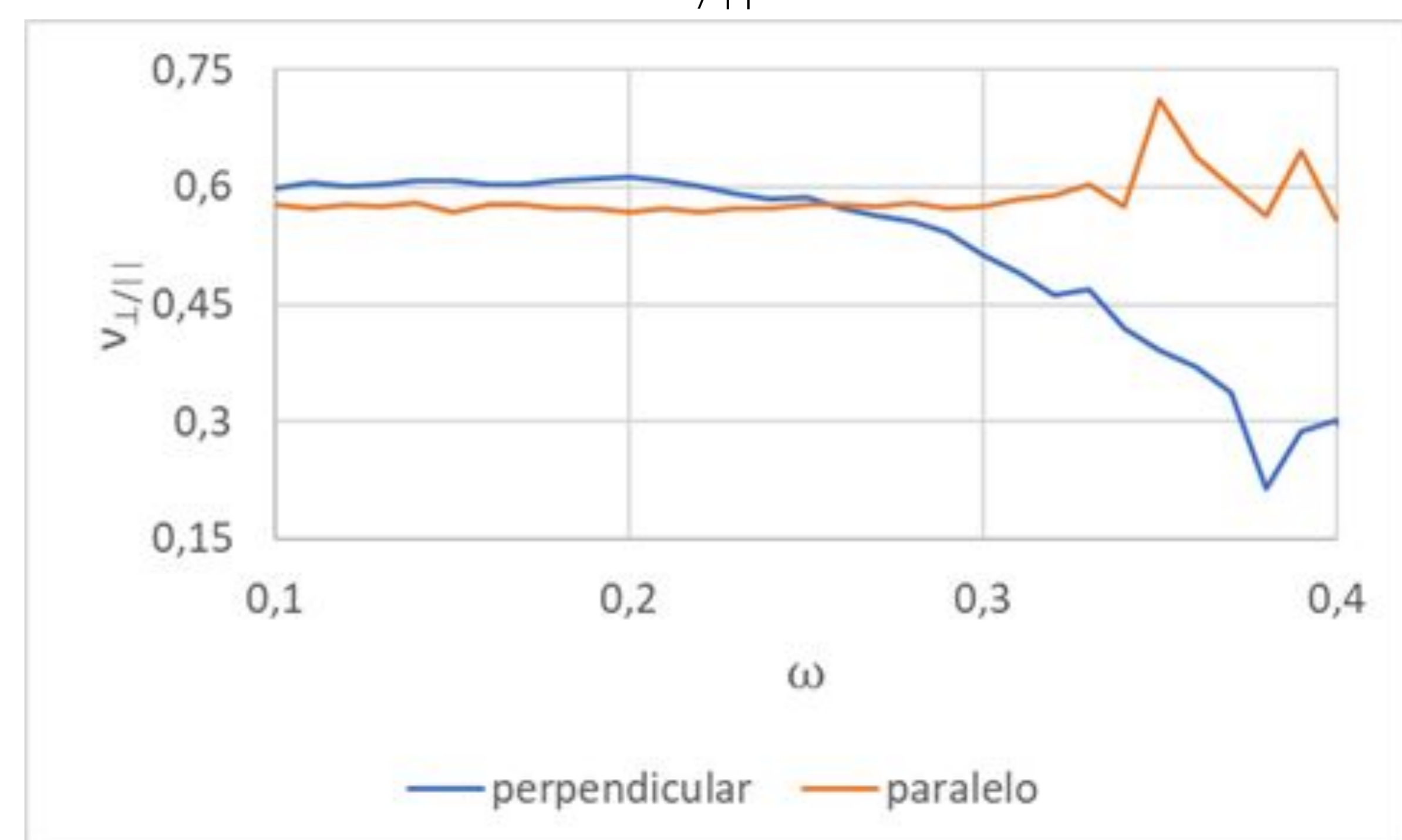
O ponto de transição de adsorção foi caracterizado em um gráfico que associa o tamanho do polímero, por meio dos expoentes de Flory para cada componente da distância de ponta-a-ponta média ao quadrado ($R_{\perp/\parallel}$), à variável ω . Utilizamos a seguinte equação:

$$v_{\perp/\parallel, n} = \frac{1}{2 \log_{10} 2} \log_{10} \left(\frac{R_{\perp/\parallel, n}^2}{R_{\perp/\parallel, n/2}^2} \right) \quad [2]$$

Resultados

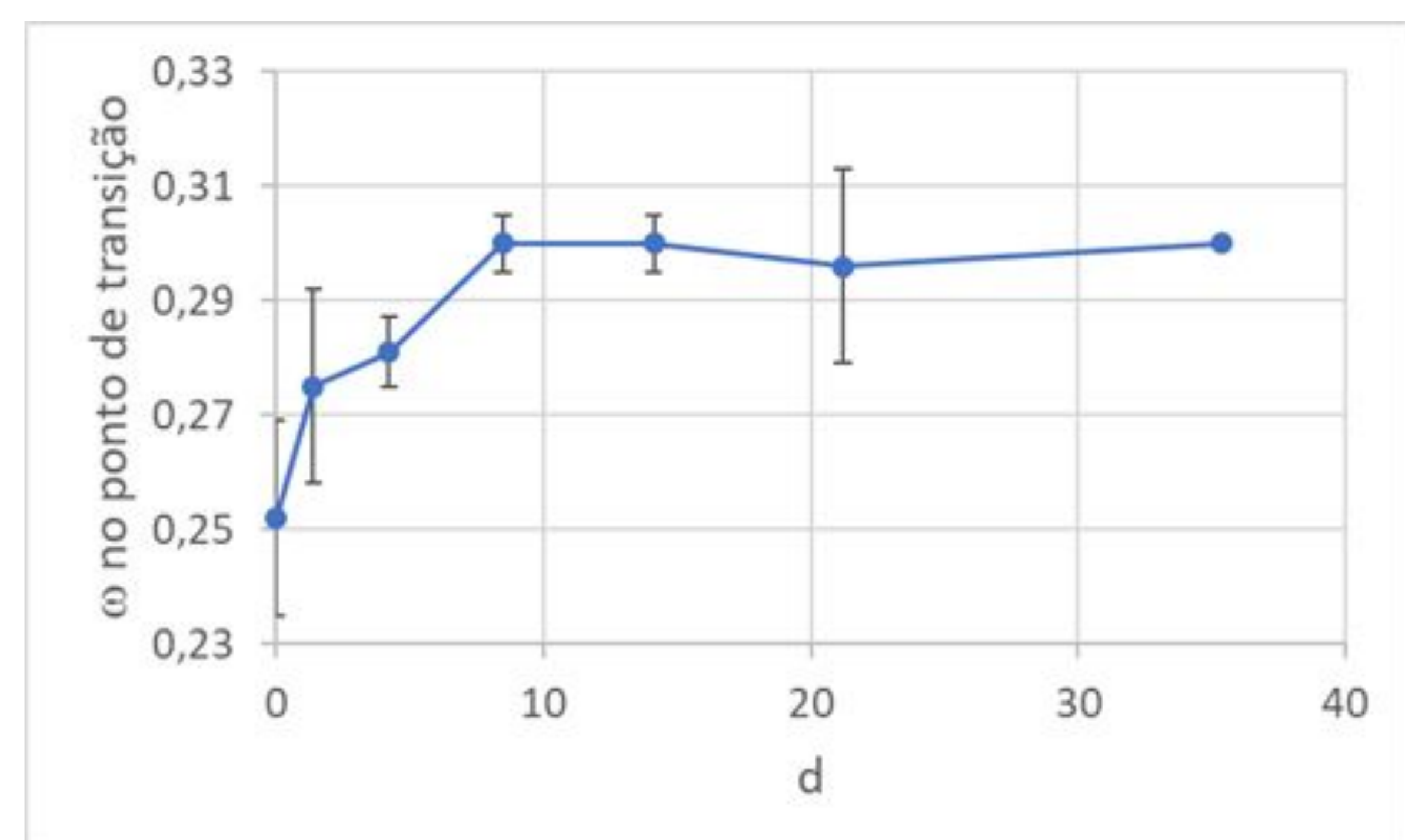
A figura A mostra um exemplo do comportamento dos expoentes de Flory em função de ω , para um polímero de 100 monômeros, preso no centro da uma ilha ($d = 0$). O cruzamento nos dá o ponto de transição.

Figura A - $v_{\perp/\parallel}$ versus ω



Os pontos de transição, como função da distância d , estão mostrados na figura B.

Figura B - ω versus d no ponto de transição de adsorção



Conclusões

A presença de uma ilha na superfície, se localizada nas proximidades de onde o polímero está preso, favorece a adsorção; isto é, provoca uma diminuição no ponto de transição de adsorção.

Apoio Financeiro



Agradecimentos

