

Simpósio de Integração Acadêmica

“Bicentenário da Independência: 200 anos de ciência, tecnologia e inovação no Brasil e 96 anos de contribuição da UFV”

SIA UFV 2022



ADSORÇÃO DE POLÍMEROS EM SUPERFÍCIES

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

Guido P. Valadão (guido.valadao@ufv.br)¹; Liliane A. Ferraz (liliane.ferraz@ufv.br)²; Tiago J. Oliveira (tiago@ufv.br)³

¹⁻²⁻³Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, UFV

Introdução

O polímero é uma macromolécula constituída por uma grande cadeia de unidades básicas que se repetem - os monômeros. O fenômeno de adsorção de polímeros constitui em seus monômeros tenderem a ficar em contato com uma superfície. A maioria dos estudos teóricos consideram superfícies perfeitamente lisas - o que raramente acontece na realidade..

Objetivos

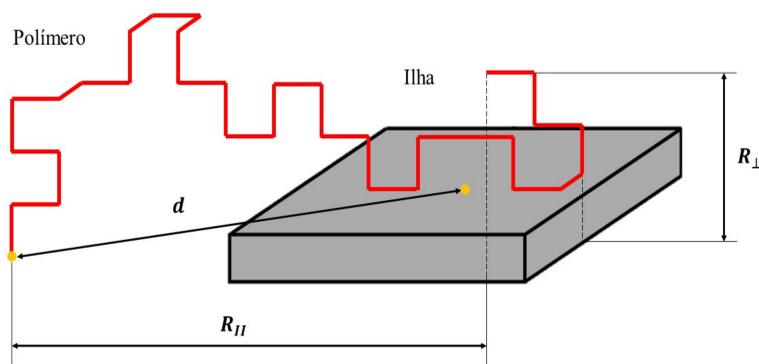
Estudar a adsorção de polímeros através de simulações computacionais considerando a presença de ilhas na superfície.

Material e Métodos

Definindo uma rede cúbica e utilizando o algoritmo de Rosenbluth para gerar caminhadas aleatórias autoexcludentes (SAWs) e com interação atrativa entre primeiros vizinhos, foi simulado como um polímero interage com uma superfície (modelada com uma rede quadrada) com uma ilha presente. A interação atrativa em cada contato polímero-superfície é introduzida através de uma variável $\omega = \epsilon/(k.T)$ - onde ϵ é a energia de interação; T a temperatura e k a constante de Boltzmann - sendo e^{ω} o peso de Boltzmann associado.

As componentes paralela ($R_{||}$) e perpendicular (R_{\perp}) da distância de ponta a ponta média (R^2) estão relacionadas com o número de passos da caminhada através dos expoentes de escala de Flory ($\nu_{\perp||,n}$) - conforme a figura abaixo.

$$\nu_{\perp||,n} = \frac{1}{2 \log_{10} 2} \log_{10} \left(\frac{R_{\perp||,n}^2}{R_{\perp||,n/2}^2} \right)$$

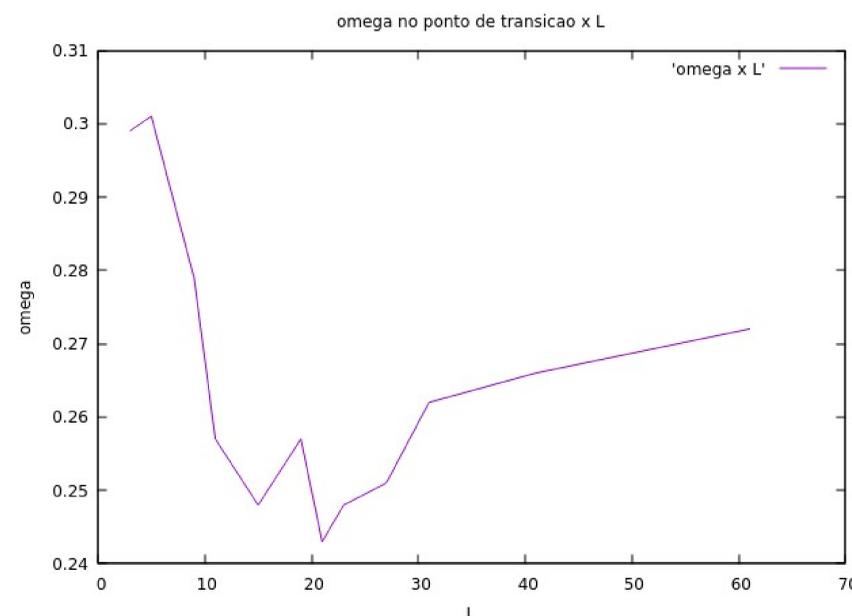


Apoio Financeiro



Resultados e Discussão

Foi analisado cerca de 10^6 amostras na rede cúbica, a notar como o tamanho lateral da ilha influencia o ponto de transição da adsorção (da fase coil para a fase adsorvida) para o caso de uma ilha centrada na origem, de onde se inicia a caminhada. Através do ponto de cruzamento dos expoentes de Flory, estimamos o ponto de transição para um determinado ω e, conforme a variável ω aumenta, o expoente relacionado à componente paralela é maior. O gráfico abaixo mostra que o tamanho da ilha introduzida na superfície altera o valor de ω . Houve uma flutuação em $L = 19$, podendo ser explicada pela baixo número de amostras (devido ao programa pouco otimizado), embora seu valor volte a crescer lentamente conforme o aumento do comprimento da ilha.



Conclusões

É notório, pela análise do gráfico anterior, que uma ilha presente nas proximidades de onde um polímero está ancorado, influencia favoravelmente a sua adsorção, já que o ω crítico é menor que o caso sem a presença da ilha - por volta de $\omega = 0,33$.

Bibliografia

- RODRIGUES, N. T. Um estudo sobre modelos para a transição de colapso em polímeros.2016. Dissertação (Mestrado em Física Aplicada) - Departamento de Física, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, MG, 2003.
- EISENRIEGLER, E. Polymers near Surfaces. Singapura: World Scientific, set. 1993, 424 p. ISBN 9789813104464.

Agradecimentos

