



SIMULAÇÃO MOLECULAR DA ADSORÇÃO DE MOLÉCULAS POLISSEGMENTADAS HETERONUCLEARES EM SUPERFÍCIES SÓLIDAS HOMOGÊNEAS

Renato Akira Okita¹ e Charles R. A. Abreu²

Faculdade de Engenharia Química – Universidade Estadual de Campinas

¹Bolsista PIBIC/CNPQ ; ²Orientador

Palavras-chave: Adsorção – Simulação – Monte Carlo

Introdução

Neste projeto, estuda-se a adsorção de moléculas polissegmentadas em superfície sólida homogênea, utilizando-se a simulação molecular como ferramenta na procura de transições de fase de segunda ordem. Considerou-se apenas a adsorção de substâncias puras com segmentos genéricos do tipo A e B, onde a energia de contato entre AA, AB e BB pode variar, criando diferentes tipos de isotermas.

Metodologia

Utilizou-se o método de Monte Carlo Grande Canônico para estudar a adsorção de dímeros e trímeros. Considerou-se o modelo de gás reticulado, no qual cada segmento adsorve em um ponto específico da matriz sólida. Os arquivos de saída foram processados em um software implementado em MATLAB para criação de imagens (*snapshots*) da simulação.

Resultados

Realizaram-se simulações para comparar o alinhamento entre dímeros homonucleares (AA) e heteronucleares (AB). A Figura 1 contém *snapshots* destas simulações.

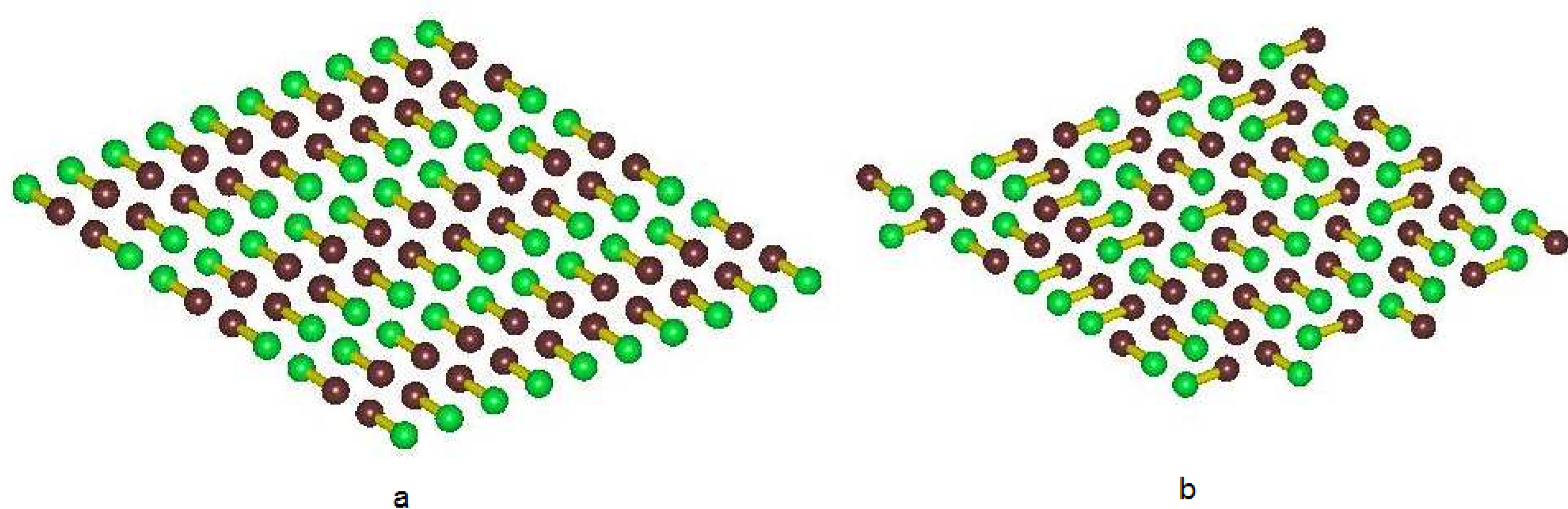


Figura 1: *Snapshots* de simulações com (a) dímeros heteronucleares e (b) dímeros homonucleares.

Na Figura 2, o fator de estrutura, que é a medida do alinhamento das moléculas, foi utilizado para analisar possíveis preferências de contato entre os segmentos.

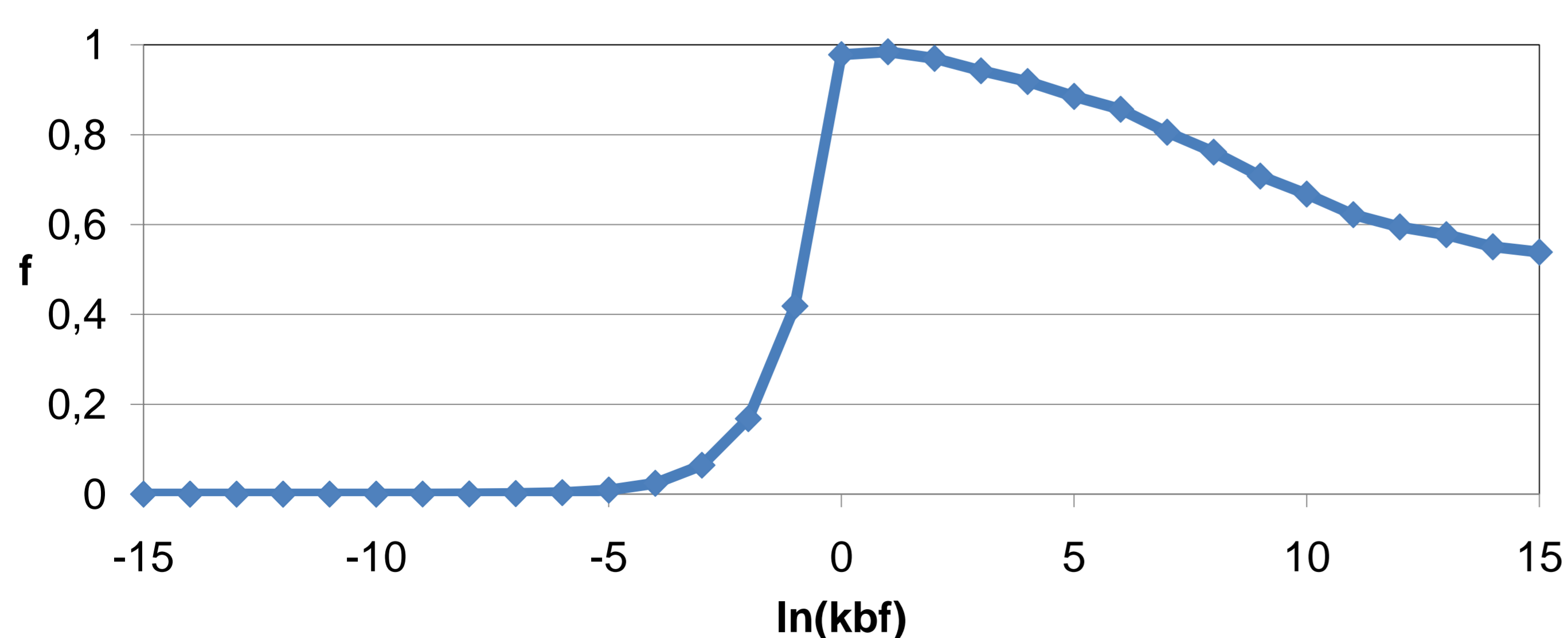


Figura 2: Gráfico do fator de estrutura por $\ln(kbf)$.

A Figura 3 é uma isoterma de adsorção, onde a fração de cobertura (θ) é a fração de sítios ocupados por segmentos de moléculas.

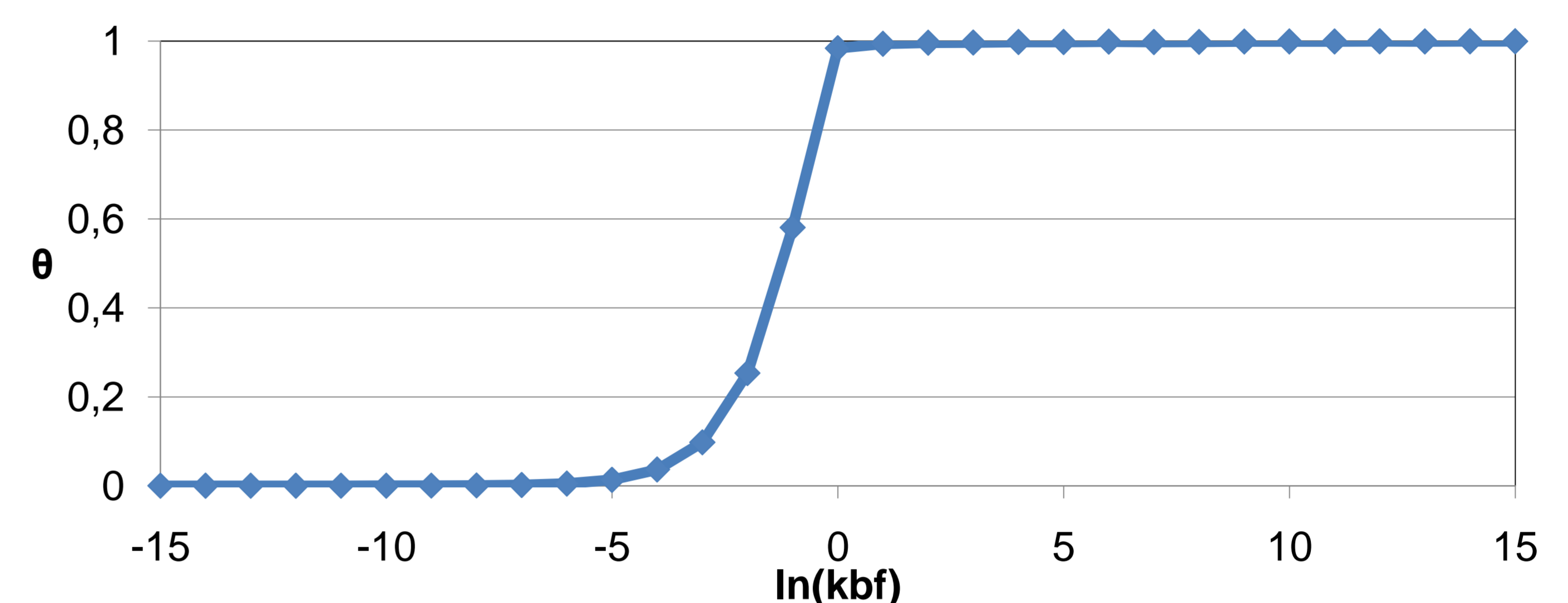


Figura 3: Isoterma de adsorção da fração de cobertura por $\ln(kbf)$.

Na Figura 4, comparam-se duas simulações com energias de interação diferentes.

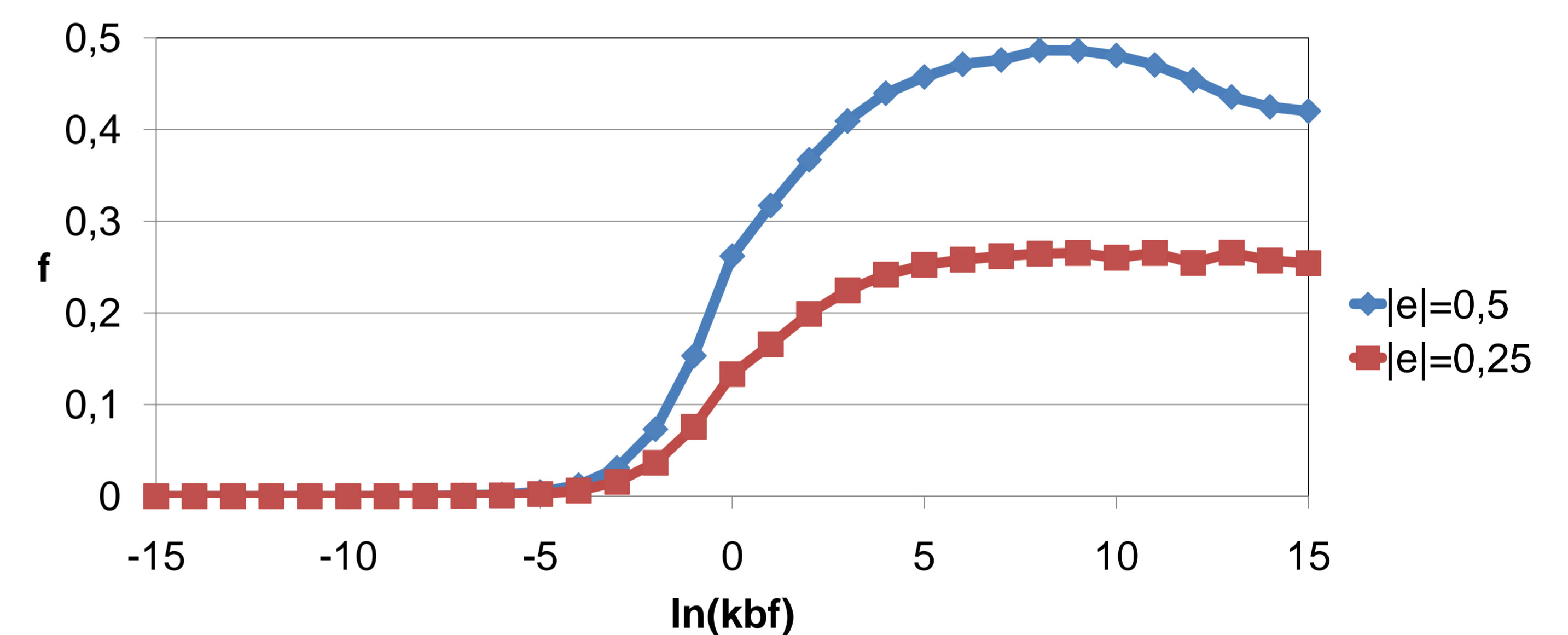


Figura 4: Gráfico do fator de estrutura por $\ln(kbf)$ da comparação de duas simulações.

Em uma simulação com trímeros, a verificação da transição de fase foi realizada através de imagens.

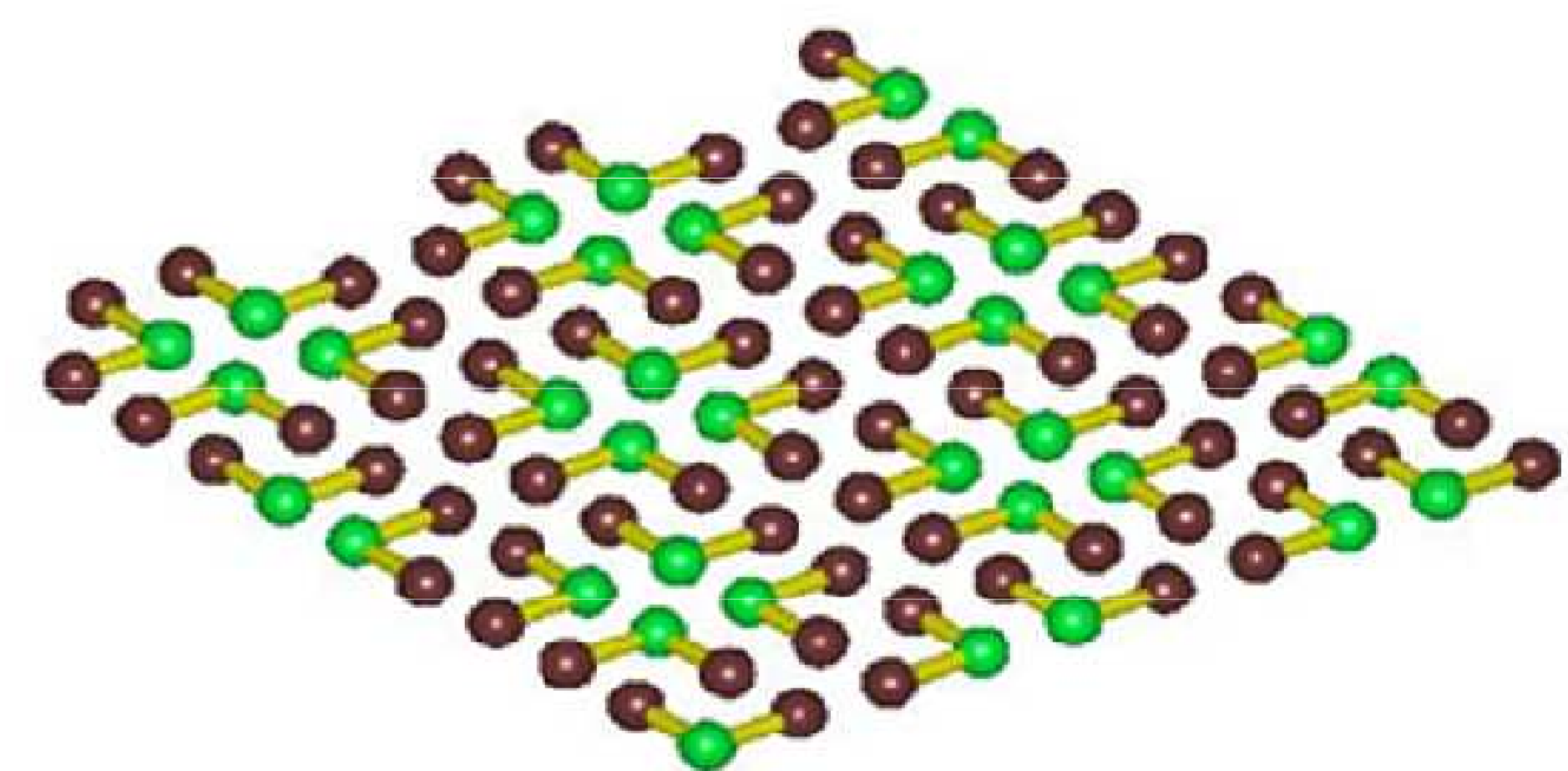


Figura 5: *Snapshot* de trímeros em fase micelar.

Na Figura 5, observa-se a existência de uma fase micelar. Esta ocorre no ponto máximo de alinhamento da simulação.

Conclusão

Através da variação da energia de interação entre as moléculas, foi possível verificar a tendência do alinhamento mesmo com sistemas envolvendo apenas forças atrativas. Esta tendência é favorecida a baixas temperaturas. Por outro lado, efeitos entrópicos predominam em temperaturas mais altas.