



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

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 polisegmentadas heteronucleares em superfície sólida heterogênea, 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 moléculas do tipo AB para dímeros e ABA para trímeros. A heterogeneidade do sólido ocorre através de sítios ativos com diferentes energias de adsorção distribuídos aleatoriamente pela sua superfície.

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 heteronucleares em *lattice* homogêneo e heterogêneo. A Figura 1 contém *snapshots* destas simulações.

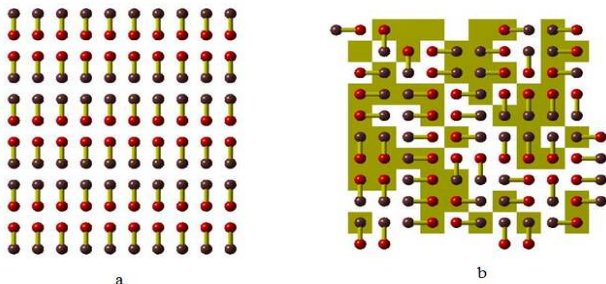


Figura 1: *Snapshots* de simulações com (a) *lattice* homogêneo (b) *lattice* heterogêneo.

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 no *lattice* heterogêneo da Figura 1b.

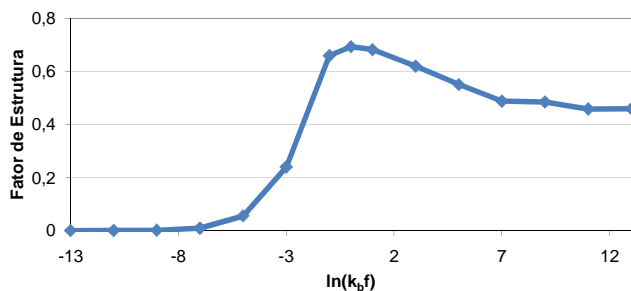


Figura 2: Gráfico do fator de estrutura em função do potencial químico.

Na Figura 3, comparam-se duas simulações com energia de interação sítio-segmeneto diferentes, onde a fração de cobertura (θ) é a fração de sítios ocupados por segmentos de moléculas.

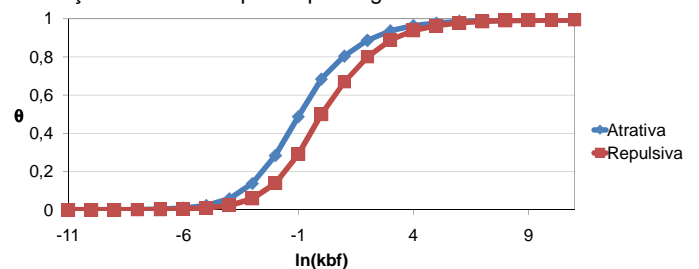


Figura 3: Isothermas de adsorção para sistemas com diferentes energias de interação sítio-segmeneto.

Na Figura 4, comparam-se simulações com diferentes porcentagens de sítios ativos.

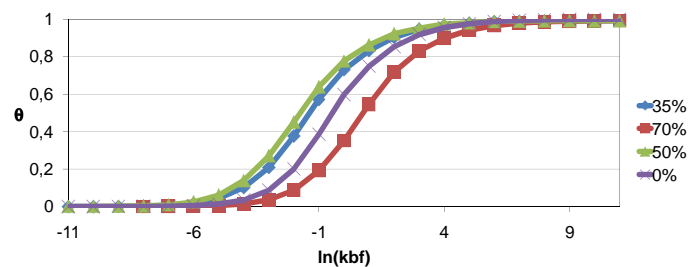


Figura 4: Isothermas de adsorção para sistemas com diferentes quantidades de sítios ativos

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

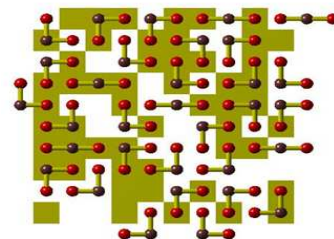


Figura 5: *Snapshot* da adsorção de trímeros em *lattice* heterogêneo.

A Figura 5 corresponde à condição de máximo alinhamento da simulação. As moléculas não estão totalmente alinhadas por causa da influência dos sítios ativos na adsorção.

Conclusão

Através deste trabalho, verificou-se a influência dos sítios ativos na configuração espacial das moléculas adsorvidas no sólido. O efeito conjunto da interação sítio-segmeneto e segmento-segmeneto é responsável pela quantidade de moléculas adsorvidas no *lattice*.