



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2019: FEIRA DE INOVAÇÃO TECNOLÓGICA DA UFRGS - FINOVA
<b>Ano</b>	2019
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Propriedades Físicas de um sistema de Nanopartículas com enxertos Poliméricos
<b>Autores</b>	RODRIGO FEDRIZZI DILLENBURG MURILO S. MARQUES JOSÉ RAFAEL BORDIN
<b>Orientador</b>	MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

## **RESUMO**

**TÍTULO DO PROJETO: Propriedades Físicas de um sistema de Nanopartículas com enxertos Poliméricos**

Aluno: RODRIGO FEDRIZZI DILLENBURG

Orientador: MARCIA CRISTINA BERNARDES BARBOSA

### **RESUMO DAS ATIVIDADES DESENVOLVIDAS PELO BOLSISTA**

No primeiro momento foi trabalhada a compreensão do modelo coarse-grained de uma solução bidimensional de nanopartículas com enxerto polimérico. Este tipo de sistema apresenta dois tipos de configurações, uma em que as caudas poliméricas são fixas e outro em que a cauda é móvel na superfície da nanopartícula. A diferença entre os dois sistemas é que no primeiro caso há sítios específicos de interação entre nanopartículas e cauda polimérica e no segundo a nanopartícula tem vários sítios de interação. Neste trabalho analisamos nanopartículas com grupos funcionais específicos para reagir com a cauda polimérica portanto os polímeros estão fixos na superfície das nanopartículas.

Em uma primeira etapa foi feita uma simulação de dinâmica molecular de um sistema bidimensional coarse-grained e foi gerada uma função de distribuição radial para uma temperatura e densidade fixas. A partir dessa distribuição foi construído um potencial de interação efetivo em que a nanopartícula com enxerto polimérico foi substituída por uma partícula composta por um caroço duro com um exterior mole. Realizamos então uma dinâmica molecular no NVT para esse sistema efetivo, a partir dessa dinâmica identificamos as diferentes fases do sistema utilizando a função de distribuição radial e a visualização das fases. Encontramos que esse sistema apresenta uma fase fluida e 3 fases estruturadas com diferentes estruturas solidas. Além disso este sistema apresenta fases reentrantes que são uma característica dos fluidos anômalos, isso significa que para uma temperatura fixa, aumentando-se continuamente a pressão passa-se de um fluido para um sólido e subsequentemente para um fluido novamente. Isso é pouco usual pois para fluidos normais o comum é que ao comprimir o sistema passasse da fase fluida para a solida e não ao contrário.

Nossos resultados indicam que essas nanopartículas com enxertos poliméricos têm propriedades pouco usuais e que o conhecimento dessa estrutura pouco comum no diagrama de fases é importante quando esses materiais forem manipulados particularmente nas regiões de fase solidas.