



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Adsorção de polianfolitos neutros à nanopartículas metálicas neutras
Autor	VINICIUS MENUCCI MUCCILLO
Orientador	ALEXANDRE PEREIRA DOS SANTOS

A importância do estudo da interação de polianfolitos com nanopartículas metálicas se dá pela aplicabilidade desse sistema em diversas áreas, como no comportamento do transporte de substâncias no corpo humano. Motivado por isso, o trabalho tem por objetivo desenvolver e implementar uma simulação de dinâmica molecular para estudar o comportamento de adsorção de polianfolitos neutros em nanopartículas metálicas neutras, simulando diversas propriedades que o polianfolito pode possuir. A simulação foi desenvolvida e implementada na linguagem de programação C, onde foi usado, para a dinâmica molecular, as equações de Langevin integradas pelo método de Velocity Verlet. O polianfolito foi modelado para permitir escolha do seu tamanho, periodicidade de cargas e rigidez, a fim de estudar separadamente a influência de cada parâmetro no comportamento. Pelo sistema escolhido ser neutro, as suas interações não são muito fortes e as simulações podem demorar para gerar os resultados. Por conta disso, ainda não foi possível concluir o objetivo final. Entretanto, já foi observado que a polarização da nanopartícula pode gerar a adsorção dos polianfolitos, dependendo dos parâmetros utilizados. Os próximos passos são estudar a influência dos da rigidez e tamanho do polianfolito em comparação com a nanopartícula para concluir quais são os melhores parâmetros para uma adsorção satisfatória.