

MOVIMENTO ATIVO DE PARTÍCULAS ATIVAS AO LONGO DE UM CRISTAL LÍQUIDO E CONFINAMENTO PARABÓLICO

Rafael Magalhães Jungmann¹; Sérgio Wladimir da Silva Apolinário²

¹Estudante do Curso de Física-Bacharelado – CCEN – UFPE; E-mail: Rafael.jungmann@ufpe.br,

²Docente/pesquisador do Depto de Física – CCEN – UFPE. E-mail: sergiowsa@df.ufpe.br .

Sumário: Nós investigamos a evolução temporal do movimento de partículas ativas, também chamadas de partículas brownianas, inseridas em um cristal-líquido iônico com a intenção de realizar estudos sobre sistemas com coeficiente de difusão diferente do relacionado a uma partícula esférica, além de procurar efeitos de compactação molecular devido à mudança de tamanho de moléculas. Utilizamos como ferramenta, simulações computacionais (numéricas) do sistema em questão, utilizando as máquinas do laboratório de física teórica e computacional do Departamento de física da UFPE. Foram obtidos resultados onde ocorre a formação de redes triangulares entre as partículas brownianas e um estado compactado das moléculas alongadas do cristal líquido onde elas se organizam de maneira simétrica e curiosa, lembrando bastante duas fases diferentes, porém coexistentes, de um cristal-líquido. Foi concluído que o sistema ainda tem muito a oferecer para a comunidade científica desde que exista um amadurecimento do trabalho.

Palavras-chave: ativa; browniana; cristal-líquido; molécula

INTRODUÇÃO

O trabalho resume-se a simular computacionalmente partículas ativas se movendo ao longo de um cristal-líquido. Esse sistema é de bastante interesse do aluno e do orientador por duas razões. Uma é o natural interesse de investigar sistemas cavernosos que ainda não foram estudados na comunidade científica. A outra é o fato de se investigar sistemas com dois tipos de entidades totalmente diferentes, que já é capaz de fornecer resultados interessantes, e também de sistemas com moléculas alongadas, ou seja, com forma de compactação e coeficiente de difusão diferente das moléculas esféricas. Ou seja, os resultados oriundos deste sistema são novos na ciência e, portanto podem abrir portas para novas pesquisas relacionadas ao assunto.

Mas é necessário antes de informar os objetivos do trabalho, definir o que é uma partícula ativa. Imaginando uma partícula comum, é bastante plausível dizer que ela só iria começar ou alterar seu movimento se atuasse sobre ela uma força qualquer, seja elétrica, química, gravitacional ou de qualquer outra origem. Uma partícula ativa seria justamente um corpo que consegue se auto-orientar ao movimento sem a ajuda de nenhum outro. Em termos matemáticos essa partícula tem uma quantidade interna de energia e pode transformá-la em energia cinética (energia associada ao movimento), ou energia potencial (energia que tende a ser cinética). Os avanços nas pesquisas de partículas ativas têm mostrado resultados bastante interessantes e precisos quando se trata de sistemas como organismos bacterianos, redes neurais, moléculas grandes e complexas. O crescimento da quantidade de pesquisas relacionadas ao assunto ocorre devido à simplicidade matemática da dinâmica ativa, de sua ampla aplicabilidade, ou seja, do grande número de sistemas os quais se pode descrever ativamente e de seu potencial para a realização de trabalhos computacionais.

O trabalho teve como objetivo geral, simular computacionalmente estas partículas de forma a compreender como serão formadas estruturas ordenadas em um sistema composto por mais de um tipo de partícula, com formas, tamanhos e coeficientes de difusões

diferentes. Essas partículas serão carregadas eletricamente e irão se movimentar ao longo de um cristal-líquido o qual é formado por moléculas alongadas, chamadas de “rods”. Os constituintes do cristal líquido interagem entre si através de repulsões elétricas de Yukawa, e os mesmos interagem com as partículas ativas através da soma do potencial de Coulomb e o de Lennard-Jones.

MATERIAIS E MÉTODOS

As ferramentas utilizadas para realizar as simulações computacionais, foram as máquinas (computadores) do laboratório de física teórica e computacional do Departamento de física da UFPE. Uma simulação computacional é apenas um programa executável cuja função é desenvolver algum sistema. No caso de sistemas moleculares o programa retorna interações numéricas que representam alguma propriedade do sistema como posições, energia e velocidade.

Os métodos estariam relacionados com os algoritmos implementados no programa. Primeiro foi pesquisado um algoritmo para simular as moléculas do cristal-líquido e foi encontrado um algoritmo bastante simples no trabalho "*Dynamical correlations in suspensions of charged rodlike macromolecules*, *PRE* **53**, 5011" realizado pelo Dr. Hartmut Löwen da Universidade de Düsseldorf. Com esse algoritmo, é possível simular as moléculas com apenas três equações:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i^{\parallel}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i^{\parallel}(t) + \frac{\Delta t}{k_b T} D_o^{\parallel} \mathbf{F}_i^{\parallel}(t) + \sqrt{2D_o^{\parallel} \Delta t} \cdot \mathbf{u}_i(t) \\ \mathbf{r}_i^{\perp}(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i^{\perp}(t) + \frac{\Delta t}{k_b T} D_o^{\perp} \mathbf{F}_i^{\perp}(t) + \sqrt{2D_o^{\perp} \Delta t} \cdot \mathbf{e}_i(t) \\ \mathbf{u}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{u}_i(t) + \frac{\Delta t}{k_b T} D_o^R \mathbf{M}_i(t) \cdot \mathbf{u}_i(t) + \sqrt{2D_o^R \Delta t} \cdot \mathbf{e}_i(t) \end{aligned}$$

onde \mathbf{r} é a posição paralela e perpendicular, respectivamente, à orientação e \mathbf{u} é a orientação da molécula.

A força entre as rods apresentou um bom nível de complexidade. Como elas são alongadas, podemos dividi-las em várias partes as quais são chamadas de sítios. Cada sítio de uma molécula interage com todos os outros de outra molécula. A interação é dada pelo já mencionado potencial repulsivo de Yukawa, ou seja, um potencial elétrico, porém de curta distância.

Para a partícula ativa foi usado o algoritmo Euler-Richarson. Nesse método, é atualizada a energia interna da partícula, com isso, é atualizada a aceleração, depois é atualizada a velocidade e por fim a posição. Nesse sentido, “atualizar” significa calcular aquela grandeza em um tempo posterior utilizando o valor dela no tempo atual.

A partícula ativa também é carregada eletricamente, com sinal oposto ao das rods, e interage com os sítios das moléculas do cristal líquido, através da soma do potencial de Coulomb e de Lennard-Jonnes. Esse potencial resultante tem a característica de ser repulsivo a pequenas distâncias e atrativo a longas distâncias.

RESULTADOS

Foram feitas várias simulações do sistema sujeito a vários agentes externos e internos diferentes, logo foram obtidos resultados diversos, porém apenas alguns conjuntos de parâmetros resultavam em formações interessantes de investigação. O conjunto de condições que apresenta maior potencial para estudos futuros é aquele na qual as partículas brownianas formam redes triangulares e as rods se organizam simetricamente nas estruturas. Este resultado está representado na figura abaixo.

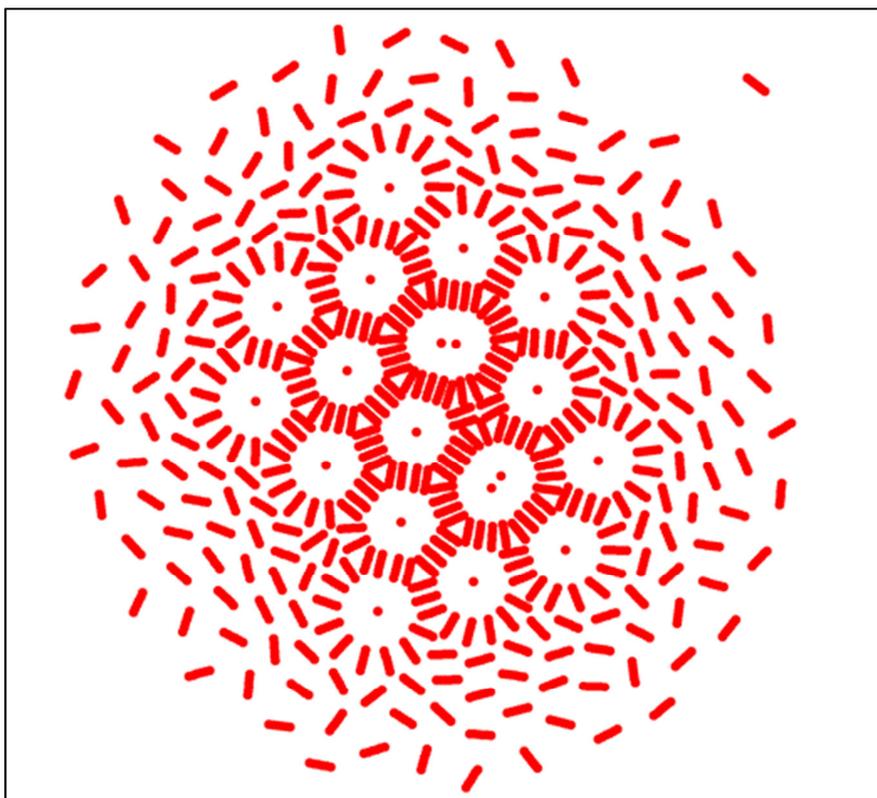


Figura 1: Redes triangulares e compactação das moléculas

DISCUSSÃO

Para obter a configuração representada na figura 1 é preciso de certas condições. O sistema total deve ser eletricamente neutro, ou seja, a carga total negativa das partículas brownianas quando somada com as cargas das moléculas do cristal líquido deve resultar em zero. Além disso, o intervalo de tempo para cada iteração deve ser muito pequeno comparado ao tempo de relaxação da molécula do cristal líquido. A última condição importante para obter essa situação é aplicar uma condição de contorno periódica ao sistema, ou seja, ele não pode estar submetido a um potencial externo confinador, caso contrário, a simetria será perdida, porém vale ressaltar que aplicando um potencial confinante, surge a possibilidade de fazer estudos sobre as deformações geradas por ele.

É bastante notável o potencial de estudos que o resultado da figura 1 gera. Note que as partículas brownianas (os pontos vermelhos) forma entre si estruturas triangulares, enquanto que as agregações entre as moléculas do cristal líquido, por serem alongadas, tem sua forma característica de se organizar. Elas tendem a ficar lado a lado com exceção das bordas externas que por si só já são interessantes, pois elas não formam nenhum tipo de agregação, e aquelas as quais definem o centro de cada triângulo formado pelas partículas brownianas. Essas últimas moléculas mencionadas formam entre si triângulos, passando um senso de simetria no sistema. Neste resultado não foi implementada a condição de sobreposição das partículas brownianas, por isso existem algumas falhas na imagem, porém isto não retira importância do resultado obtido.

Este resultado foi tão interessante que nos fez pedir uma segunda opinião sobre ele e esta opinião está sendo investigada atualmente e gerou uma possível colaboração entre mais de um pesquisador.

CONCLUSÕES

É claramente notável que este sistema apresenta grande potencial científico, precisando apenas de amadurecimento intelectual. Este potencial existe por algumas razões como, o trabalho trata de um sistema com mais de um tipo de entidades, as partículas brownianas e as moléculas do cristal líquido, com interações diferentes entre si, logo os números de estudo não realizados pela comunidade científica aumenta bastante. Outra razão é justamente o fato de tratar de moléculas não esféricas com tamanho variável, isto permite o aluno entrar em uma área ainda bastante cavernosa da ciência.

Um trabalho futuro que está sendo investigado relacionado ao assunto é o derretimento da configuração final, ou seja, aumentar a temperatura até a perda total das redes triangulares e, portanto, investigar o efeito do tamanho da molécula na construção das estruturas formadas.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq/PIBIC pelo financiamento do projeto através do programa de iniciação científica e agradecemos a Lucas de Queiroz pela ajuda no desenvolvimento do código-fonte.

REFERÊNCIAS

- SCHWEITZER, FRANK. **Brownian Agents and Active Particles**, Springer Series, 2007.
- RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Simulations**, Cambridge University Press, 2004.
- KIRCHHOFF, Th.; LÖWEN, H.; KLEIN, R. München, Dynamical correlations in suspensions of charged rodlike macromolecules, PRE **53**, 5011, 1996.