



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

Fluidos complexos: transição de colapso em polímeros e gases de rede associativos

Jürgen F. Stilck

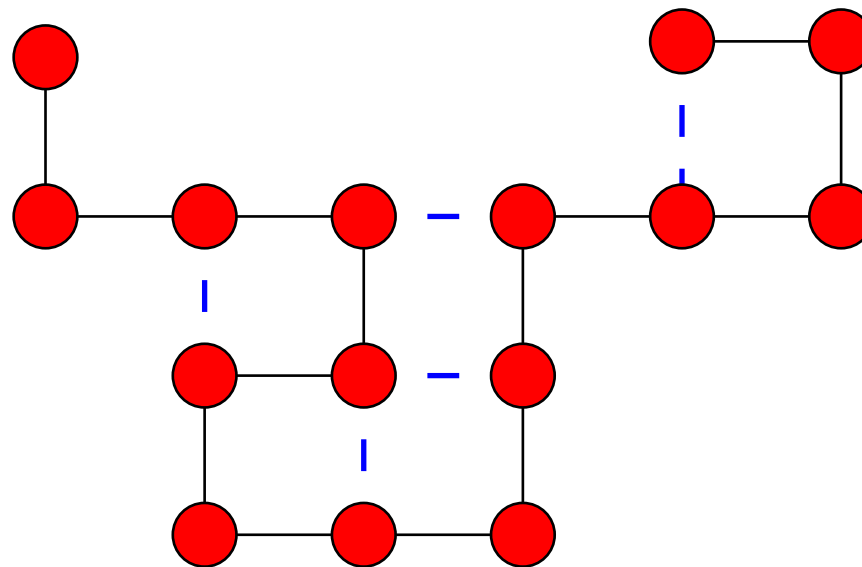
Instituto de Física-UFF

Roteiro

Modelo de caminhadas interagentes (ISAW) Modelo de caminhadas com múltiplos monômeros por sitio (MMS)
Cálculos de entropia de polímeros Modelos de fluidos com ligações de hidrogênio

Caminhadas interagentes (ISAW)

Polímeros em maus solventes: transição estendida-colapsada ao baixar a temperatura (ordem-desordem). Pode ser modelada por caminhadas auto- e mutuamente excludentes com interações atrativas (energia $-\epsilon$) entre monômeros em sitios primeiros vizinhos:

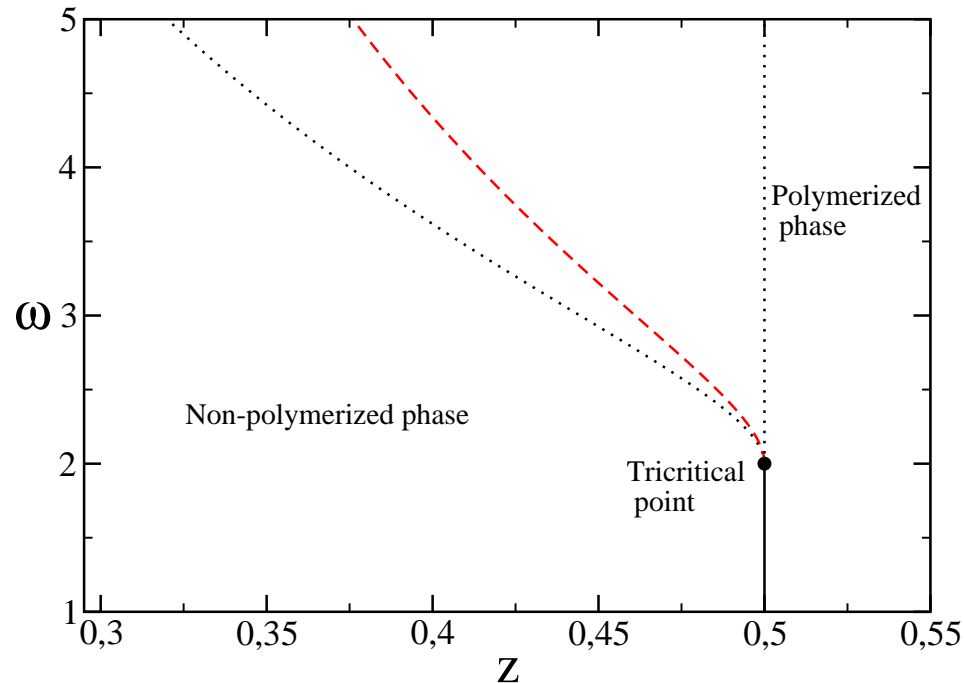


Peso estatístico da contribuição (grande-canônico): $z^{15} \omega^5$,

$$z = e^{\beta\mu}, \omega = e^{\beta\epsilon}.$$

Caminhadas interagentes (ISAW)

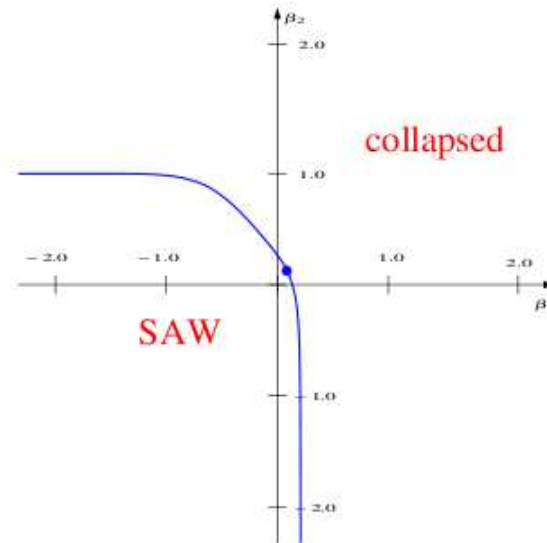
Diagrama de fases grande-canônico do modelo:



No canônico: Estamos sempre na região de coexistência (crítica ou não) entre as fases **P** e **NP**. Transição estendida-colapsada **contínua**.

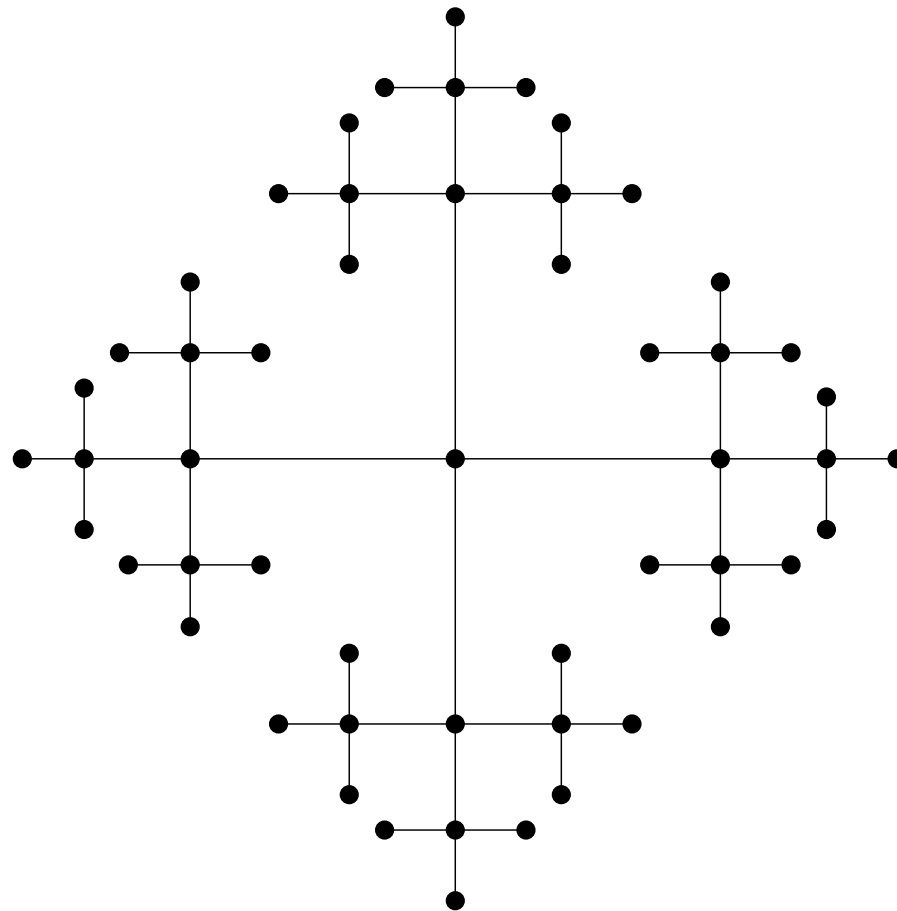
Modelo MMS

Diagrama de fases obtido por simulações:



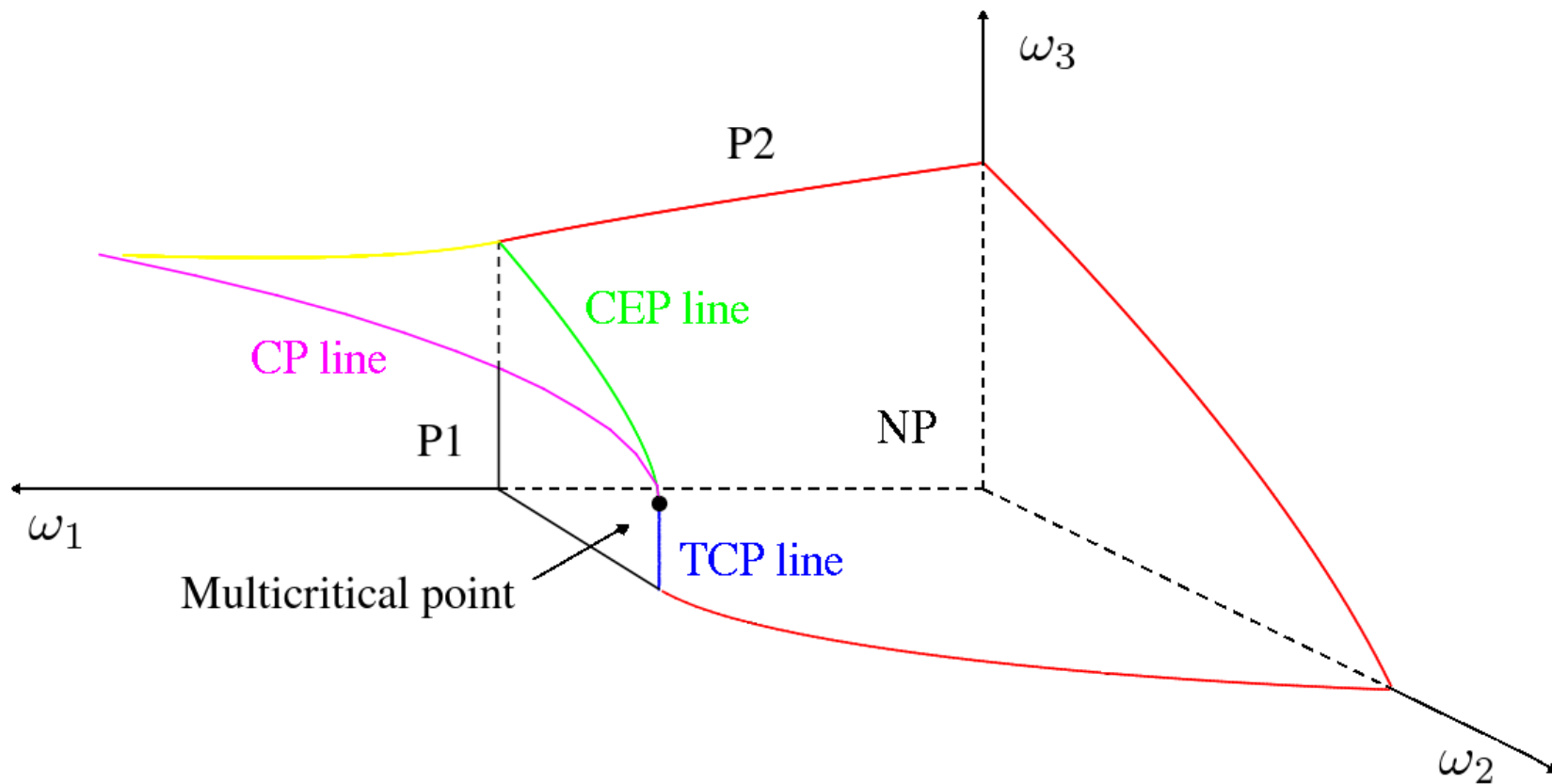
Modelo MMS

Resolvemos, com Tiago J. de Oliveira e Pablo Serra, o modelo $K = 3$ na rede de Bethe (região central de uma árvore de Cayley):



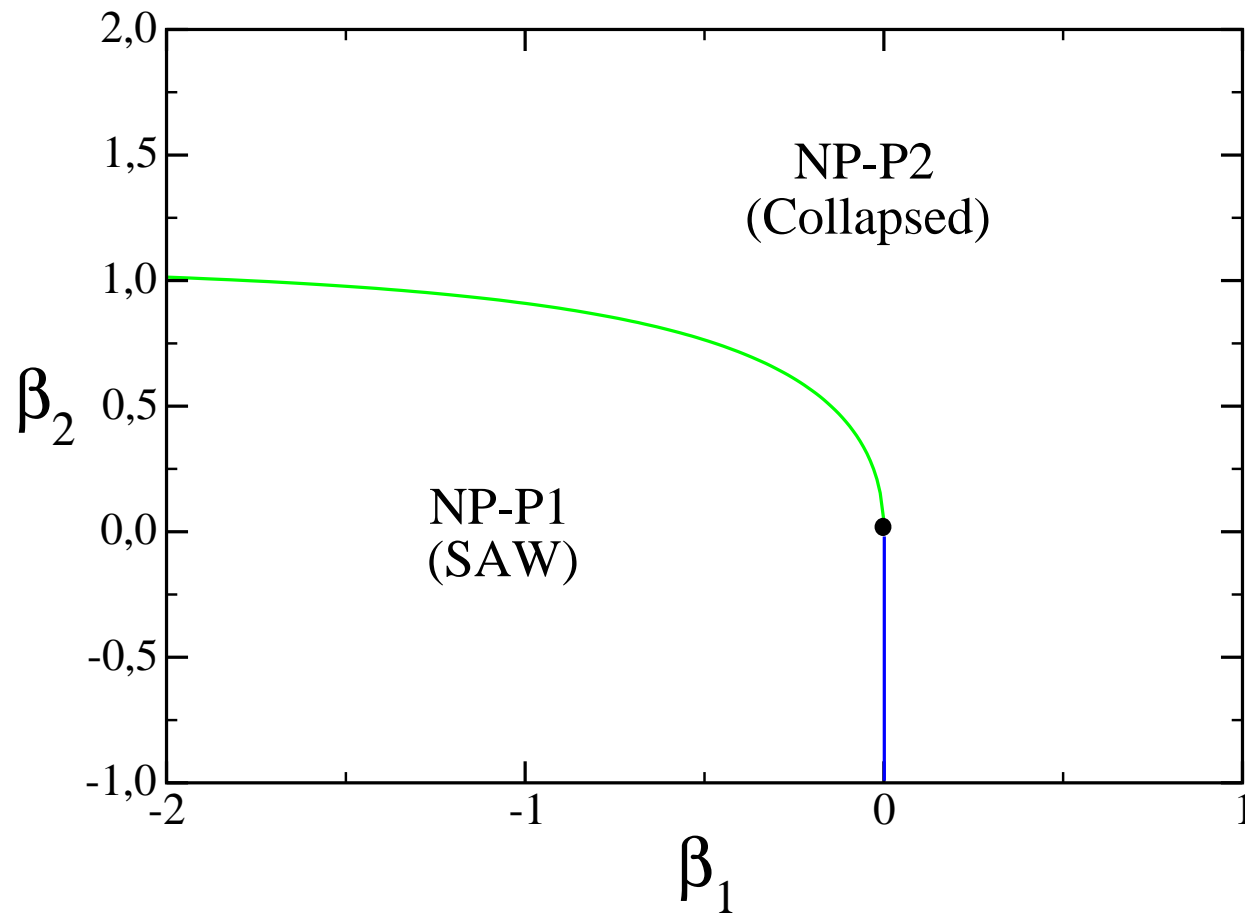
Modelo MMS

A solução é definida pelo ponto fixo de um sistema de relações de recorrência em três variáveis. Diagrama de fases obtido:



Modelo MMS

Diagrama de fases canônico:



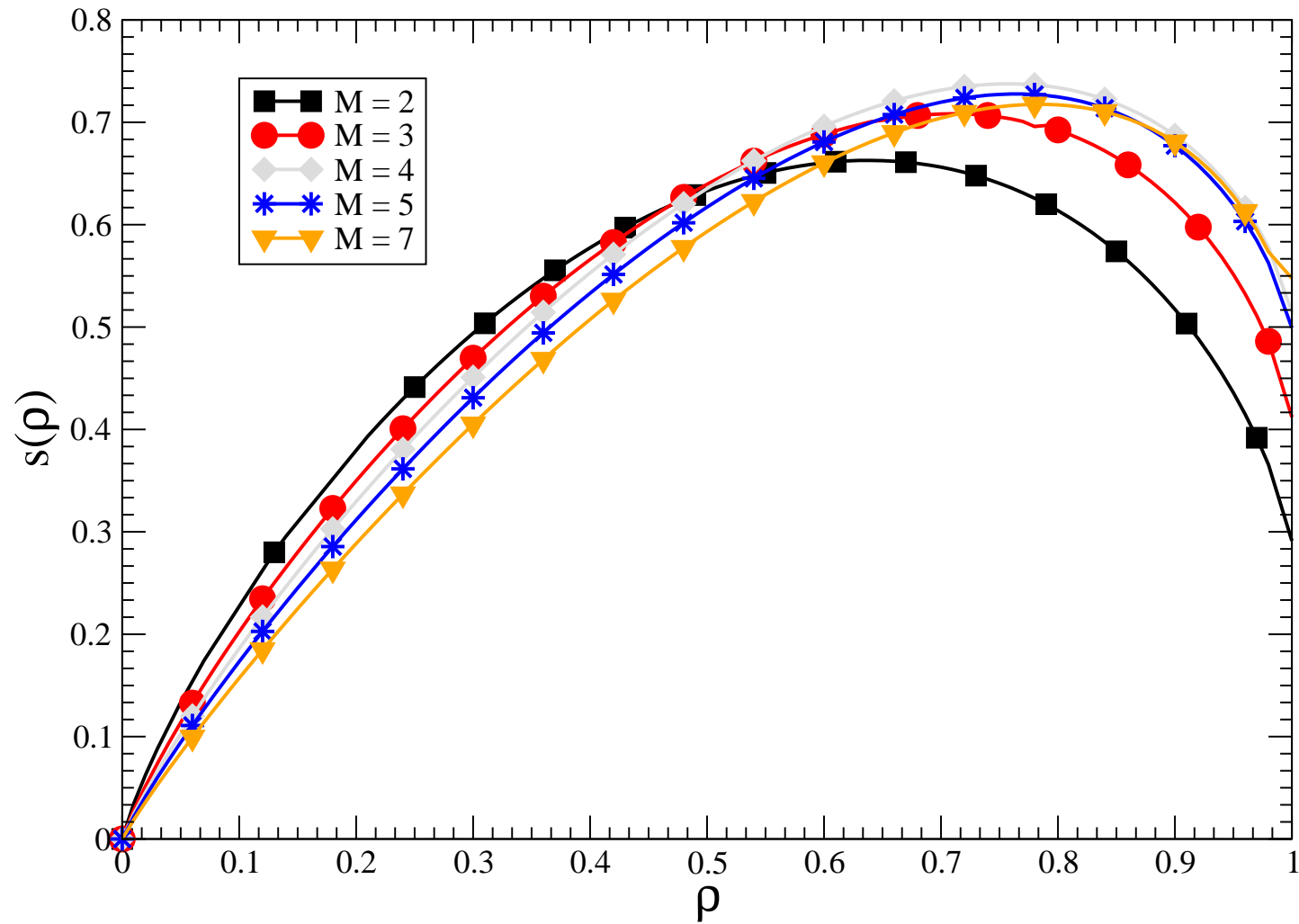
Modelo MMS

Relação entre os modelos SASAW e MMS (modelos celulares): $\omega_i = z^i \omega^{e(i)}$, com $e(i) = i(i-1)/2$. Para o modelo $K = 3$ isso implica $\beta_2 = 3\beta_1$. Ponto multicrítico faz parte dessa reta na solução do modelo na rede de Bethe Como se situa essa reta em relação ao ponto multicrítico nas simulações? É possível que a reta cruze a linha de pontos tricríticos.

Entropia de polímeros

Questão: de quantas podemos inscrever cadeias de M monômeros cada, com no máximo um monômero por sitio, de maneira que os monômeros ocupem uma fração ρ dos sitios da rede: entropia $s_M(\rho)$ Caso exatamente resolvido: $s_2(1) = G/\pi \approx 0,29156\dots$. Usando técnicas de matriz de transferência e extrapolações de FSS, podemos encontrar boas estimativas para essa entropia na rede quadrada (com Wellington G. Dantas):

Entropia de polímeros



Fluidos com ligações de hidrogênio

Fluidos com ligações de hidrogênio (água): gases de rede associativos. Modelo de um gás de rede associativo na rede triangular (A. L. Balladares, V. B. Henriques, and M. C. Barbosa, J. Phys.: Condens. Matter **19**,116105 (2007)). Resolvemos, com Tiago J. de Oliveira e Marco Aurélio A. Barbosa, esse modelo no ensemble grande-canônico numa rede de Cayley constuída com hexágonos (rede de Husimi). Exemplo de resultado:

Fluidos com ligações de hidrogênio

